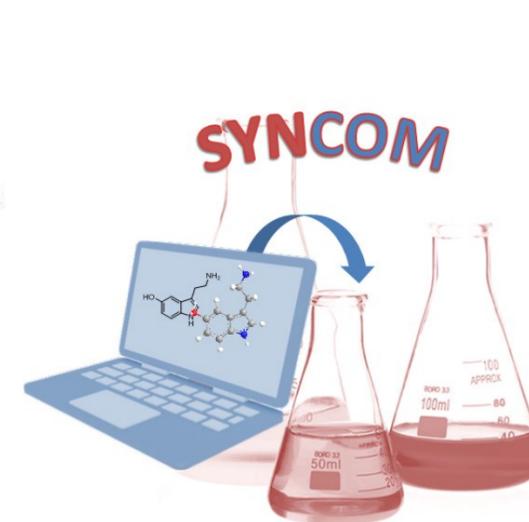


# Gruppo SYNCOM



FABRIZIO MANETTI  
MARCO PAOLINO  
ANTONELLA BRIZZI  
ANDREA TAFI  
CLAUDIA MUGNAINI

Università degli Studi di Siena  
DIPARTIMENTO DI BIOTECNOLOGIE CHIMICA E FARMACIA

**SYNCOM**

LABORATORIO DI SINTESI ORGANICA E  
CHIMICA COMPUTAZIONALE

## L'attività di ricerca



Il gruppo di ricerca è articolato su due ambiti chiave, la chimica organica di sintesi e la chimica computazionale, fortemente complementari ed in completa sinergia tra loro.

- **Chimica organica di sintesi**

Riguarda principalmente il campo chimico-farmaceutico con l'obiettivo di realizzare nuove entità chimiche dotate di attività biologica e/o diagnostica che, in prospettiva, possano rappresentare nuovi leads e di individuare, in un'ottica più generale, nuovi prototipi terapeutici. Il gruppo di ricerca, inoltre, è interessato allo sviluppo di nuove metodologie chimiche e chimico-farmaceutiche nel contesto chimico-farmaceutico.

- **Chimica computazionale**

Riguarda essenzialmente il campo chimico-farmaceutico ed è incentrata sullo studio dell'interazione tra il farmaco e il suo bersaglio macromolecolare

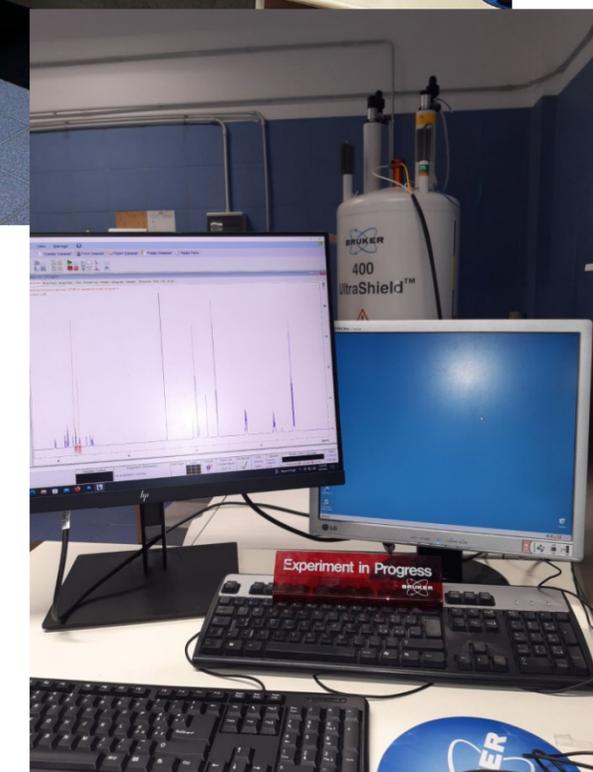
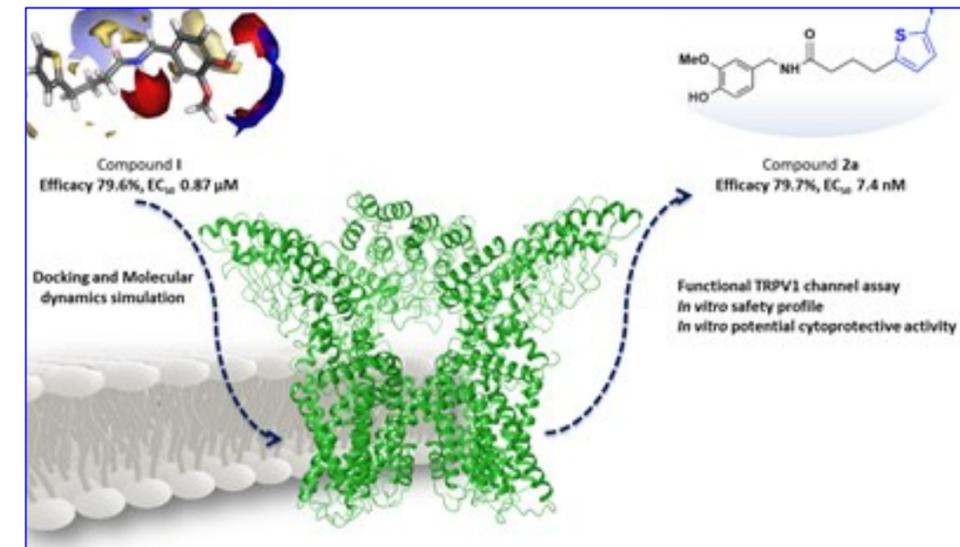
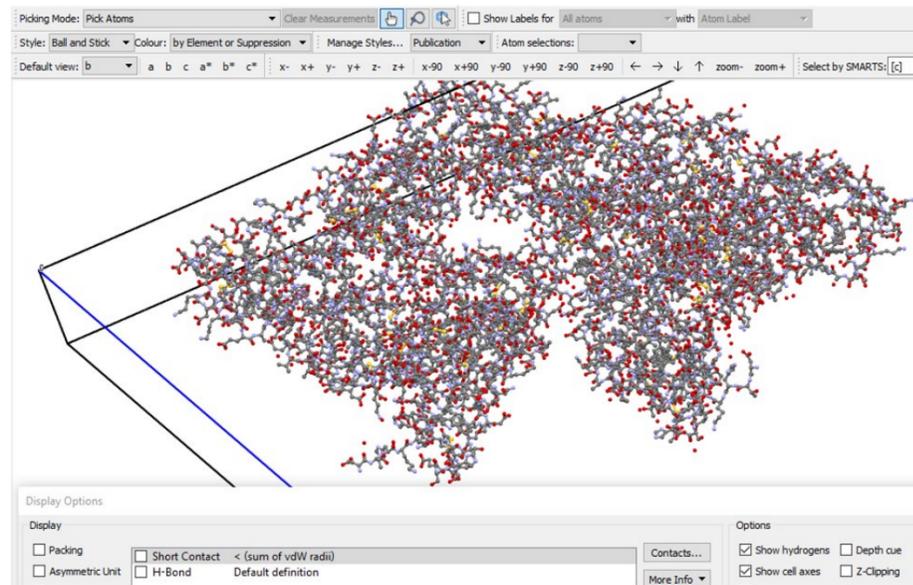
Le principali **linee di ricerca** riguardano:

- Modulatore dei recettori CB1, CB2, TRPA1, TRPV, GABAB, 5-HT3, CBR
- Composti duali a potenziale attività neurodegenerativa
- Composti ad attività antibatterica, antitubercolare, antitumorale
- Terapia fotofarmacologica attraverso lo sviluppo di ligandi ad attività biologica fotomodulabile reversibile (target principali ChE, MAO)
- Sviluppo di marcatori fluorescenti

Le **competenze del gruppo di ricerca** coinvolgono:

- Progettazione di nuove molecole di interesse farmaceutico
- Modifica di molecole naturali di interesse farmaceutico
- Creazioni di modelli farmacoforici da applicare nello screening virtuale
- Elaborazione di modelli recettoriali
- Valutazione in silico delle proprietà chimico fisiche delle molecole
- Applicazione di algoritmi di Machine Learning (IA) a problematiche chimiche
- Sintesi organica
- Purificazione e analisi dei composti organici
- Determinazione sperimentale della solubilità e del logP di molecole organiche

# Disegni e Immagini



## Strumenti, Tecnologie e Servizi



Il gruppo è dotato di suite software e workstation di modellazione molecolare all'avanguardia. L'unità si avvale, inoltre, di un cluster di computer ad alte prestazioni dotato di 640 processori Intel Skylake Gold, 3800 GB di RAM, 20 TB di spazio di archiviazione e 6 GPU Nvidia V100 (21000 cuda core in totale).

È disponibile un laboratorio di sintesi completamente attrezzato con un'unità CEM Discover (CEM Corp, Matthews, NC) e strumentazioni per analisi chimiche tra tre spettrometri NMR (Bruker Fourier80, Bruker Avance 400 e Bruker DRX-600), un AGILENT serie LC-MSD 1100 con interfaccia elettrospray, spettrofotometro UV Cary-60 Agilent, FT-IR Cary 630. Inoltre, il gruppo ha accesso al Centro MS dotato di sistemi HPLC/UHPLC di ultima generazione e del sistema Bruker timsTOF completamente attrezzato per la proteomica

Le attività erogabili alle imprese sono:

- Sintesi su richiesta di nuove molecole organiche
- Fornitura di molecole organiche appartenenti alla chemoteca interna
- Purificazione, analisi e identificazione di molecole organiche
- Elaborazioni di modelli recettoriali
- Elaborazioni di modelli farmacoforici
- Docking
- Virtual screening di librerie di composti

Possibili  
applicazioni e  
collaborazioni



Attività già svolte per le imprese.

Il gruppo di ricerca ha esperienze di collaborazione con aziende farmaceutiche, diagnostiche e cosmetiche sull'intero territorio nazionale ed è disponibile all'applicazione dei seguenti servizi:

- Sintesi su richiesta di nuove molecole organiche di interesse farmaceutico
- Fornitura di molecole organiche appartenenti alla chemoteca interna
- Caratterizzazione strutturale e chimico-fisica di piccole molecole organiche
- Studi di QSAR, 3D-QSAR e di modellismo molecolare
- Investigazione di target farmacologici su richiesta, dalla progettazione razionale alla sintesi di nuove molecole bioattive.
- Sviluppo di strumenti farmacologici nella medicina di precisione.

Per maggiori informazioni



Ufficio di Trasferimento Tecnologico dell'Università di Siena

Sede: Banchi di sotto, 55 - Siena

Sito web: <https://research.unisi.it>

E-mail: [ricerca@unisi.it](mailto:ricerca@unisi.it) - [liaison@unisi.it](mailto:liaison@unisi.it)

Per maggiori informazioni



Ufficio Regionale di Trasferimento Tecnologico

Sede: Via Luigi Carlo Farini, 8 - 50121 Firenze, FI

E-mail: [urtt@regione.toscana.it](mailto:urtt@regione.toscana.it)

