



SOCIETA' CHIMICA ITALIANA

SCI 2006

**Sotto l'Alto Patronato del
Presidente della Repubblica Italiana**

**XXII Congresso Nazionale della
Società Chimica Italiana
Firenze, 10 - 15 Settembre 2006**

Atti del Congresso

SBI-P-33

Determinazione di plasticizzanti rilasciati da linee in PVC durante i cicli di dialisi

Daniela Zampino,^a Giuseppina Scaltro,^a Concetto Puglisi,^a Maria Rosaria Di Francesca,^b Anna Maria Zoccolo,^b Pietro Castellino,^b Alfredo Fiaccabrinio^c

^a CNR - Istituto di Chimica e Tecnologia dei Polimeri, Viale A. Doria, 6 95125 Catania, e-mail: zampino@ictmp.ct.cnr.it

^b Istituto di Medicina Interna (A. Francaviglia), Azienda Policlinico, Università degli Studi di Catania

^c Milena Pharmaceuticals s.r.l. Agrigento

Il polivinil cloruro (PVC), un materiale polimerico utilizzato in molti settori (edile, imballaggio, sanitario, ecc.), necessita per il suo utilizzo dell'aggiunta di grandi quantità ($\geq 50\%$) di plasticizzanti. Tra questi predominano gli esteri degli acidi ftalici, come il di(2-etilesil) ftalato (DEHP), che vengono rilasciati nel tempo, diventando dei contaminanti ambientali ubiquitari. Poiché l'esposizione continua al DEHP potrebbe provocare effetti tossici sull'uomo, sul mercato, come alternativa al DEHP, si sta diffondendo l'utilizzo di altri plasticizzanti, come ad es. il tri(2-etilesil) trimellitato (TOTM). Uno degli impieghi più diffusi del PVC nel settore biomedicale consiste nella realizzazione di dispositivi per dialisi, pertanto lo scopo di questo lavoro è stata la quantificazione, mediante HPLC, dell'esposizione e della ritenzione di DEHP e di TOTM in pazienti dializzati, utilizzando durante i cicli di dialisi, linee classiche in PVC-DEHP e nuove linee in PVC-TOTM. Gli alti valori di esposizione e ritenzione di DEHP riscontrati utilizzando le linee classiche in PVC-DEHP si sono notevolmente ridotti in seguito all'uso delle nuove linee in PVC-TOTM, registrando di contro un rilascio in TOTM molto basso se confrontato con quello del DEHP.

SBI-P-34

An NMR Study on Nickel Binding to Cap43 Protein

Maria Antonietta Zoroddu,^a Massimiliano Peana,^b Serenella Medici^a

^a Dipartimento di Chimica, Università di Sassari, Via Vienna 2, 07100, Sassari. zoroddu@uniss.it. ^b CERM, Centro di Risonanze Magnetiche, Università di Firenze, Via L. Sacconi 6, 50019 Sesto Fiorentino (Firenze).

Cap43 has been reported to be specifically induced by nickel compounds in a variety of cell lines.^{1,2} Its function is not yet clear, but Cap43 protein does appear to be induced in response to an increase in intracellular concentration of Ca^{2+} , caused by nickel ion exposure in cultured human cells.² Cap43 is expressed at low levels in normal tissues. However, in a variety of cancers, it is overexpressed in cancer cells.

The peculiarity of Cap43 is its mono-histidinic motif consisting of ten amino acids (TRSRSHSTSEG) repeated three times in the C-terminus.

We have analyzed, for Ni(II) binding, the 30-amino acid C-terminal sequence of the protein, TRSRSHSTSEG-TRSRSHSTSEG-TRSRSHSTSEG, by the use of different NMR techniques such as 1D, NOESY, TOCSY and ROESY experiments.³ From the data thus collected we calculated a model of the structure for the peptide-Ni(II) complex, confirming the characteristic binding of a nickel ion to each 10-amino acid fragment and showing the interesting structural changes the peptide undergoes upon metal coordination.

1. Zhou, D.; Salnikow, K.; Costa M. *Cancer Res.* 1998, 58, 2182-2189. 2. Salnikow, K.; Zhou, D.; Kluz, T.; Wang, C.; Costa, M. in: *Metal and Genetics*, (Sarkar Bed), New York, 1999, 131-144. 3 CERM and Prof. Bertini (University of Florence) are gratefully acknowledged for the use of NMR facility.

SBI-P-35

Improvements in Understanding Nickel Toxicity and Carcinogenesis through NMR Studies: the Case of Nickel Binding to Histone H4

Maria Antonietta Zoroddu,^a Massimiliano Peana,^b Serenella Medici^a

^a Dipartimento di Chimica, Università di Sassari, Via Vienna 2, 07100, Sassari. zoroddu@uniss.it. ^b CERM, Centro di Risonanze Magnetiche, Università di Firenze, Via L. Sacconi 6, 50019 Sesto Fiorentino (Firenze).

Although nickel has been shown to be an essential trace element involved in the metabolism of bacteria, archaea, plants and higher organisms, the carcinogenicity of certain nickel compounds has been confirmed by the combination of epidemiological evidence in humans and carcinogenesis bioassays in animals and it is probably due to alterations in gene expression rather than by direct DNA damage

We have previously reported that Ni(II) is a potent suppressor of histone H4 acetylation, in both yeast and mammalian cells.¹⁻³

Here we present our recent results on the coordination ability of Ni(II) to the N-terminal tail of Histone H4 achieved by the use of NMR techniques like 1D, 2D Tocsy and Noesy ¹H NMR experiments.³ A structural model of the peptide-Ni(II) complex has been calculated, pointing out the important structural changes occurring to the peptide upon coordination.

1. Broday, L.; Peng, W.; Kuo, M.H.; Salnikow, K.; Zoroddu, M.A.; Costa, M. *Cancer Res.* 2000, 60, 238-240. 2. Zoroddu, M.A.; Peana, M.; Kowalik-Jankowska, T.; Kozlowski, H.; Costa, M. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 2002, 458-465. 3. Zoroddu, M.A.; Schinocca, L.; Kowalik-Jankowska, T.; Kozlowski, H.; Salnikow, K.; Costa, M. *Environ. Health Perspect.* 2002, 110, 719-723. 3 CERM (University of Florence) is gratefully acknowledged for the use of NMR facility.

**Improvements in Understanding Nickel Toxicity and Carcinogenesis through NMR Studies:
the Case of Nickel Binding to Histone H4**

M.A. Zoroddu,^a M. Peana,^b S. Medici^a

^a*Department of Chemistry, University of Sassari, Via Vienna 2, 07100, Sassari, ITALY*

^b*Cerm, Centro di Risonanze Magnetiche, Università di Firenze, Via L. Sacconi 6, 50019 Sesto Fiorentino (Firenze)*

zoroddu@uniss.it

References

1. Broday L., Peng W., Kuo M.H., Salnikow K., Zoroddu M.A., Costa M., *Cancer Res.* 60, 238-244 (2000)
2. M.A. Zoroddu, M. Peana, T. Kowalik-Jankowska, H. Kozlowski, M. Costa, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, **2002**, pp. 458–465
3. Zoroddu MA., Schinocca L., Kowalik-Jankowska T., Kozlowski H., Salnikow K., Costa M., *Environ Health Perspect.*, 110 Suppl 5, 719-23 (2002)