

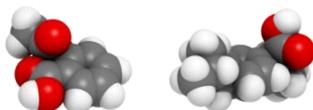
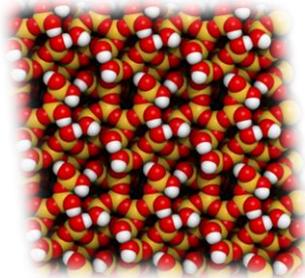
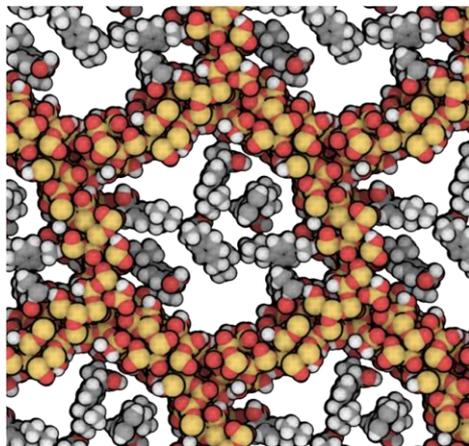


Piero Ugliengo

Ruolo chimico-fisico delle superfici inorganiche

Incapsulamento di farmaci

Protezione/trasporto farmaco in substrati inorganici come le silici mesoporose



Materiali Biocompatibili

*Biovetro di Hench
Interazione aminoacidi/idrossiapatite*

Metodologia: Modellistica molecolare ab-initio. Gaussian-03, CRYSTAL06

Strumentazione: Calcolatore elettronico, cluster di calcolatori

Pre-requisiti: Modellistica, Fisica, Matematica, elementi di stato solido, altri da apprendere durante la tesi come Linux di base

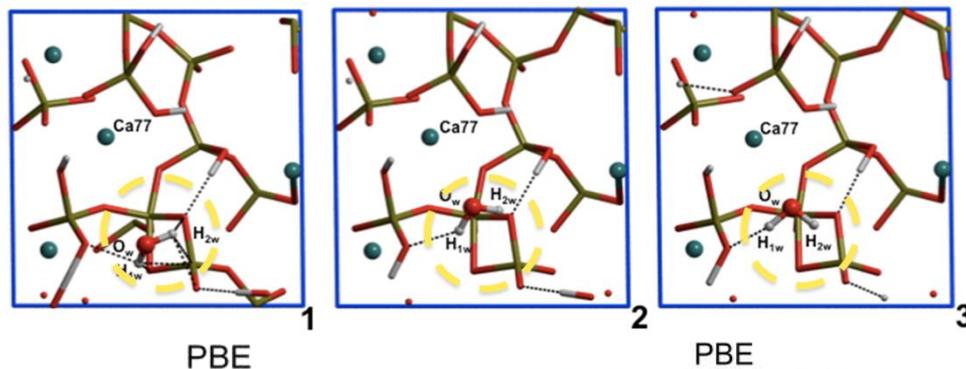
Impegno studente: Non più di 2-3 esami, 1 anno di lavoro



Tesi magistrali recenti

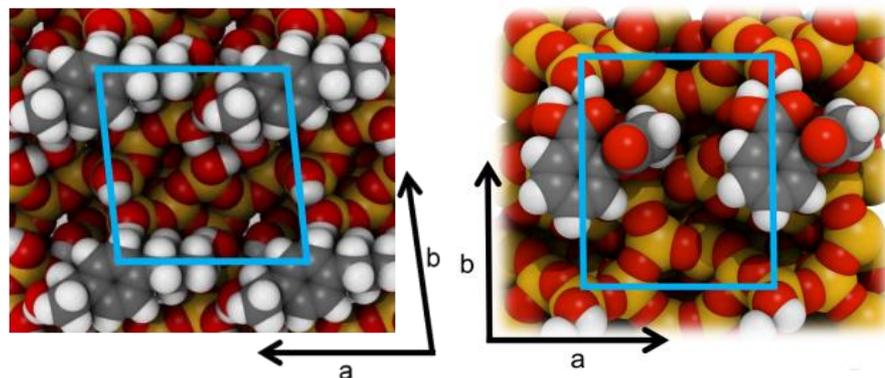
Simulazione *ab initio* dei biovetri di Hench

E. Berardo, 2011



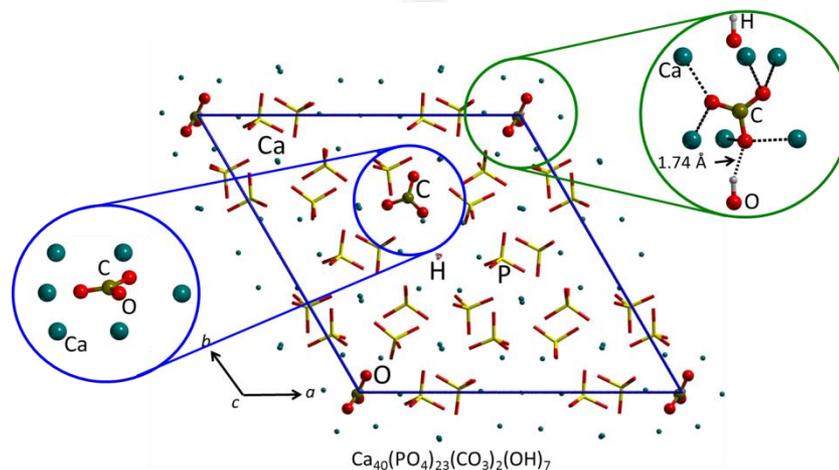
Quantum-mechanical study of the interactions between drugs and amorphous silica

M. Delle Piane, 2011



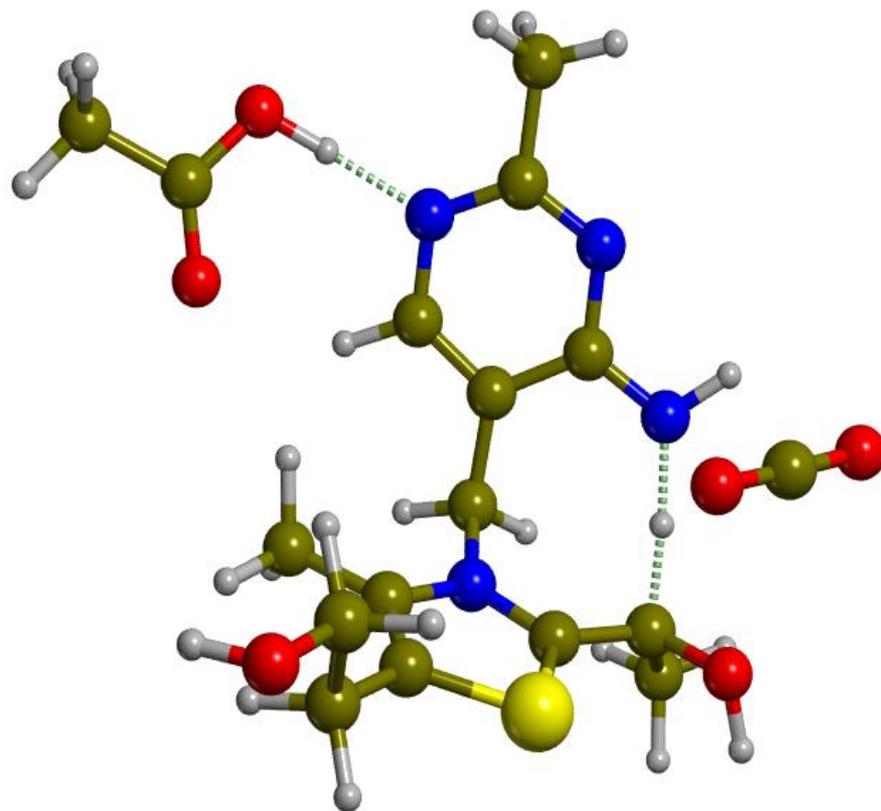
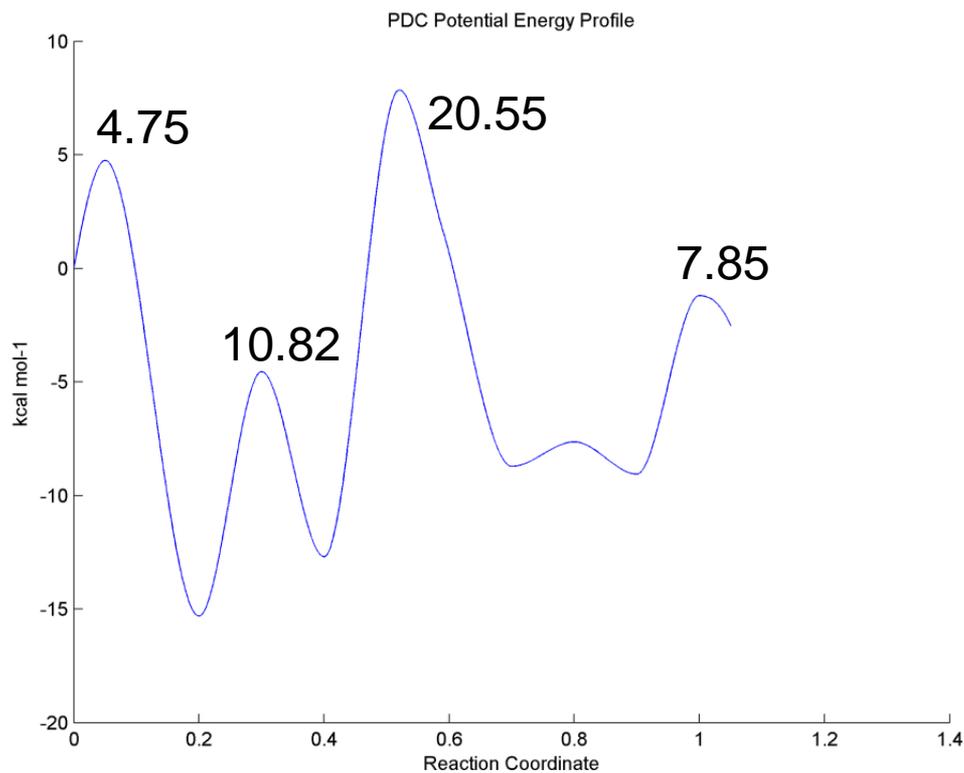
Studio DFT sui difetti di carbonatazione di Idrossiapatiti

G. Ulian, 2010



Profili di energia su meccanismi di catalisi enzimatica

Profilo di energia potenziale per il ciclo catalitico della piruvato decarbossilasi

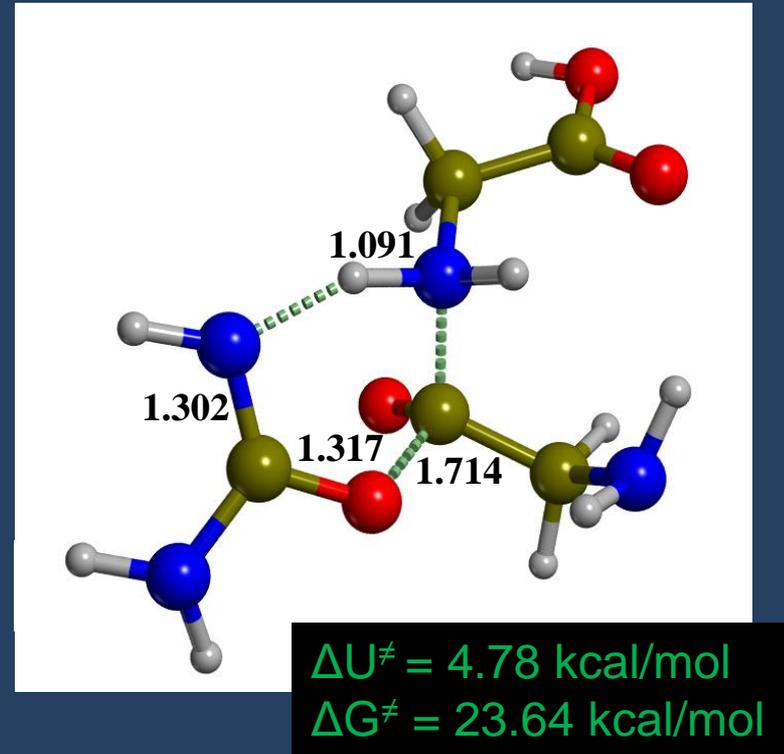
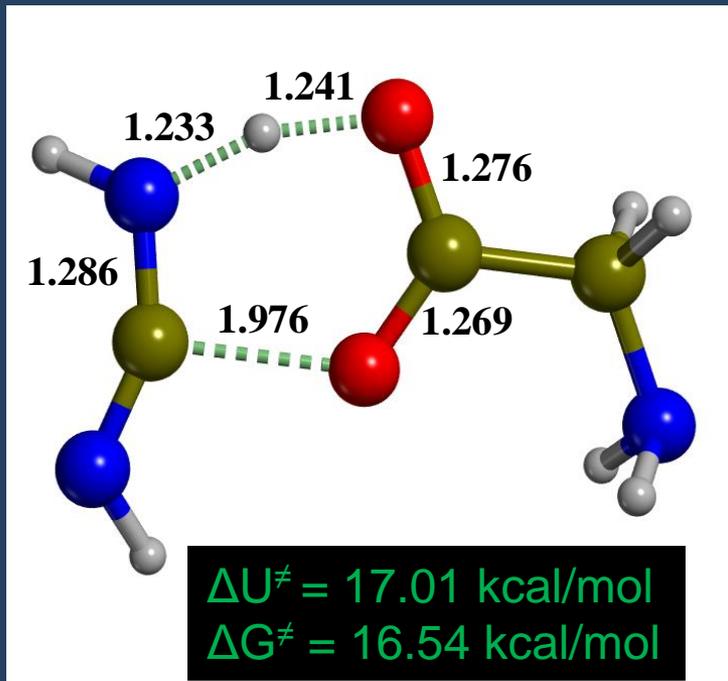


Δu 20.55 kcal/mol

Struttura di transizione per il trasferimento intramolecolare di un protone dal gruppo amminico al carbonio enolico dell'intermedio enaminico del tautomero 4'-amminopirimidinico della ThDP

Studi termodinamici e cinetici su reazioni di interesse nella chimica prebiotica cometaria e terrestre

Struttura B3LYP/6-31G(d,p) dello stato di transizione per l'attacco nucleofilo di una molecola di glicina alla carbodiimide



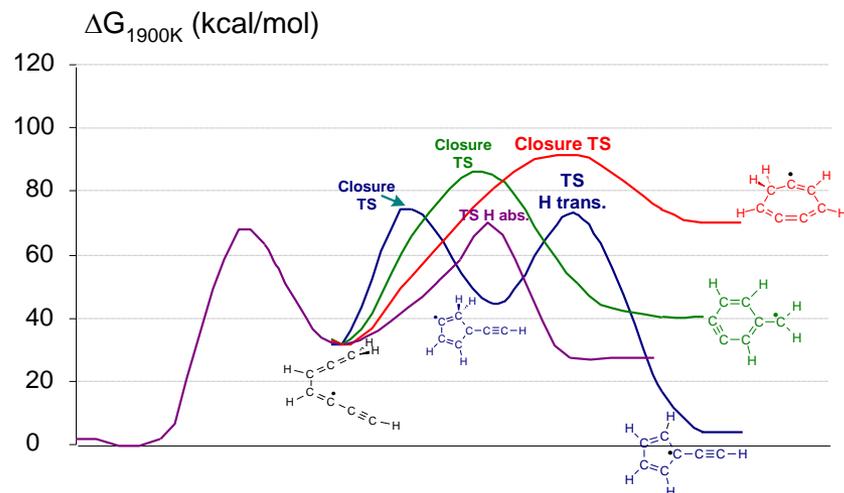
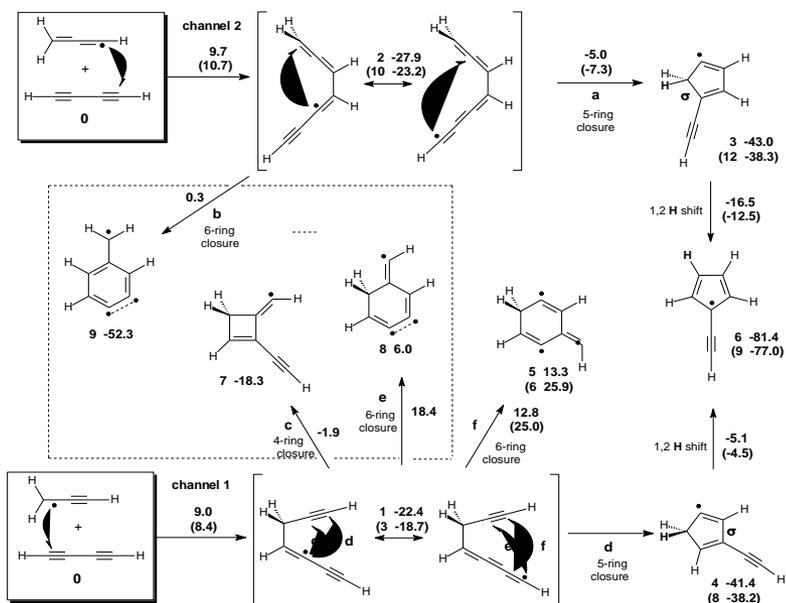
Struttura B3LYP/6-31G(d,p) dello stato di transizione per la formazione del legame peptidico tra due molecole di glicina catalizzata da carbodiimide

Studi teorici di meccanismi di reazione

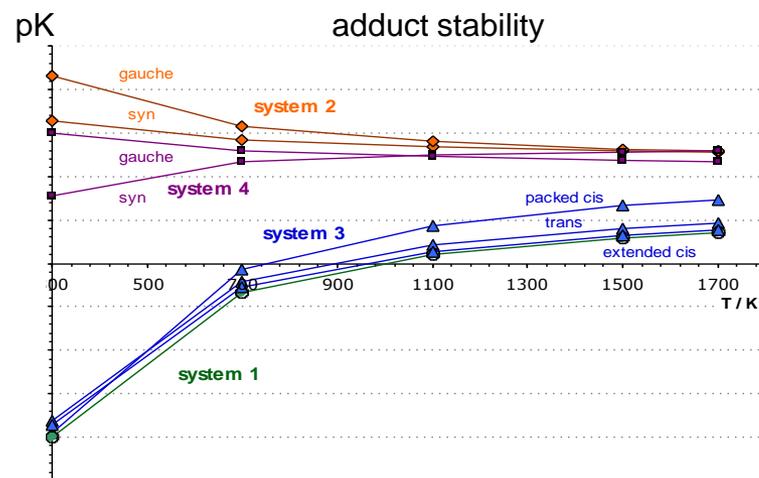
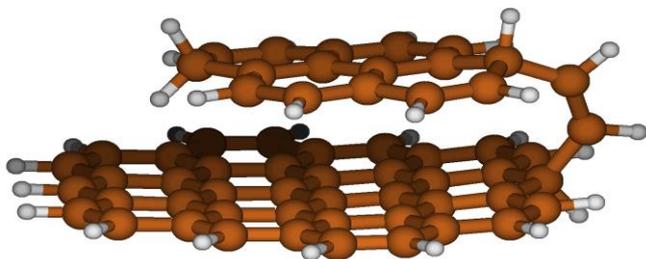
Glauco Tonachini, Giovanni Ghigo, Andrea Maranzana

Ossidazioni atmosferiche e processi combustivi:

Formazione di anelli aromatici ed idrocarburi policiclici aromatici (IPA)

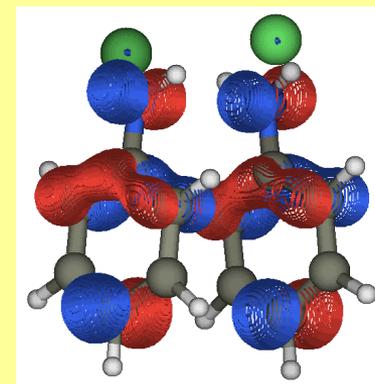
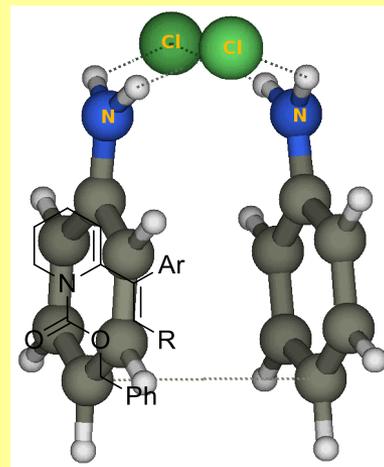
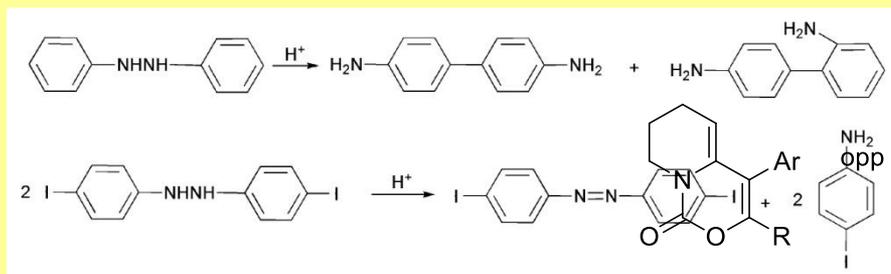


Formazione di nanoparticelle di particolato atmosferico carbonioso dagli IPA



Meccanismi di reazione passanti per specie con struttura elettronica complessa (ionici e diradicali)

Trasposizione Benzidinica: riarrangiamento v/s dismutazione.



Metodologia: Studio dei cammini di reazione con metodi quantomeccanici *ab initio* multiconfigurazionali (**CASSCF**, **CASPT2**), Coupled Cluster e **DFT**. Programmi: **Gaussian09**, **MolCAS 7**.

Strumentazione: *Calcolatori Linux*.

Calcolo ab-initio delle proprietà di solidi e superfici

Messa a punto degli
strumenti di calcolo

CRYSTAL09

(www.crystal.unito.it)

CRYSCOR

(www.cryscor.unito.it)

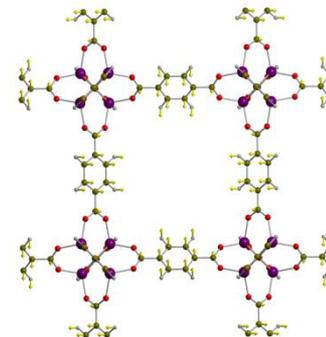
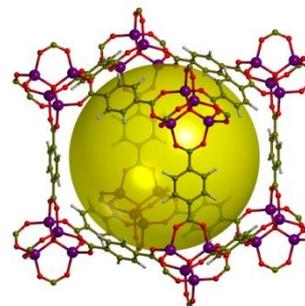
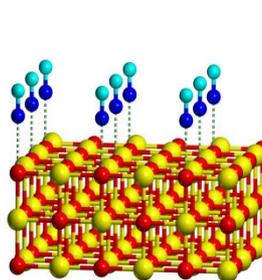
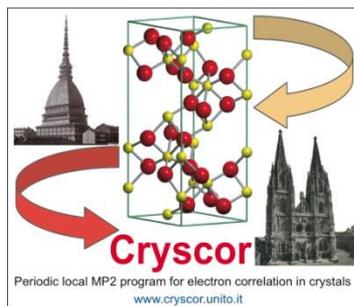
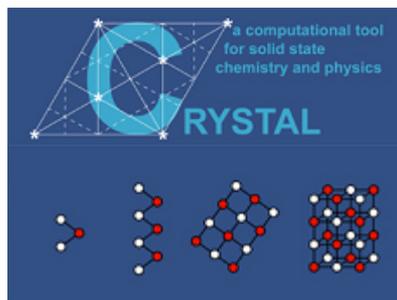
Proprietà elettroniche, strutturali,
vibrazionali, dielettriche, magnetiche,
elastiche, ... , e reattività

Solidi di interesse mineralogico (es. granati)

Adsorbimento su superfici (es. CO/MgO, H₂ in MOF)

Cristalli molecolari (es. ghiaccio, clatrati)

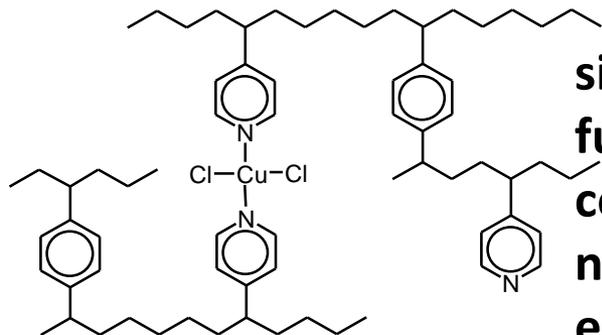
Materiali nanostrutturati (es. interfacce metallo ossido)



Strumentazione: *Calcolatore elettronico, cluster di calcolatori*

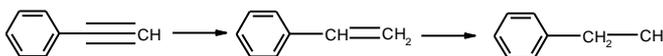
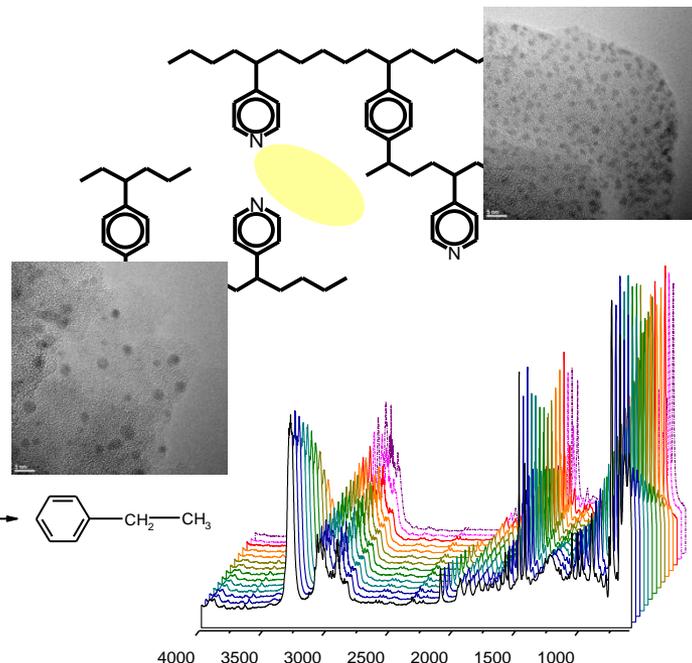
Pre-requisiti: *Modellistica, Fisica, Matematica.*
Altre nozioni (es. Linux di base) da apprendere durante la tesi





**sintesi di polimeri e loro
funzionalizzazione con
centri metallici e
nanoparticelle per catalisi
ed adsorbimento**

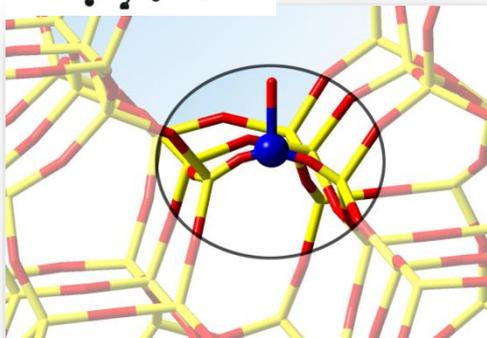
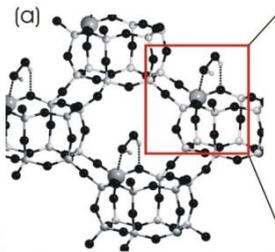
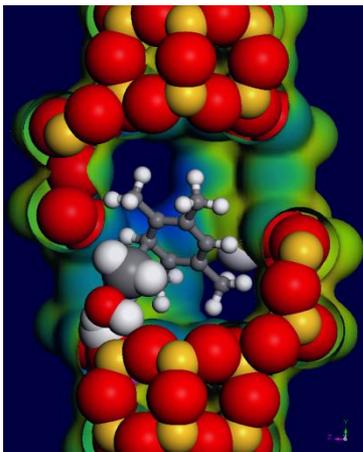
**referimenti: Silvia Bordiga,
Carlo Lamberti**



HALDOR TOPSOE 
CATALYSING YOUR BUSINESS

**catalisi in zeoliti : acida e redox
Caratterizzazione di zeoliti per il
processo MTH; sviluppo di
catalizzatori DeNOx;**

**referimenti: Silvia Bordiga,
Francesca Bonino, Carlo Lamberti**



Carbon Dioxide Capture

Carbon Dioxide Capture: Prospects for New Materials

Deanna M. D'Alessandro,* Berend Smit,* and Jeffrey R. Long*

Adsorbimento e separazione di CO₂ e di altre molecole gassose di interesse in campo energetico

Riferimenti: Silvia Bordiga,
Francesca Bonino, Carlo
Lamberti

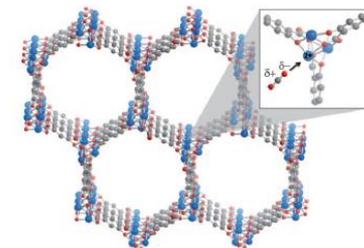
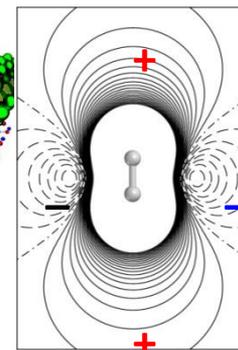
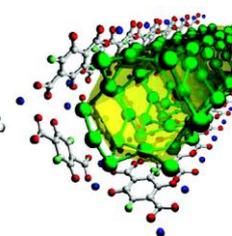
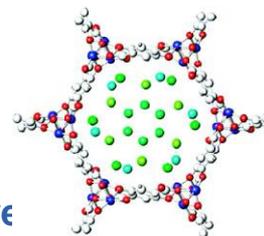
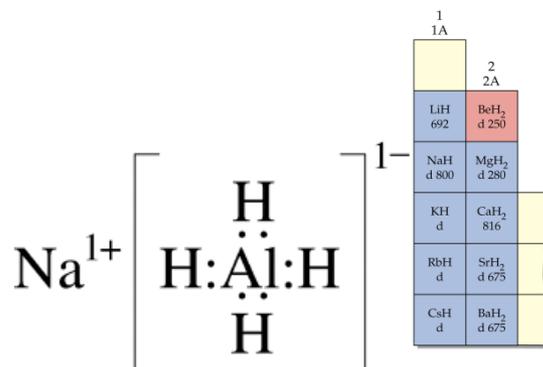


Figure 4. The crystal structure of [Mg₂(dobdc)] viewed along the one-dimensional channels.¹¹³ The inset shows the charge-induced interaction between one of the open Mg²⁺ coordination sites and a CO₂ molecule. Blue, red, and gray spheres represent Mg, O, and C atoms, respectively. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

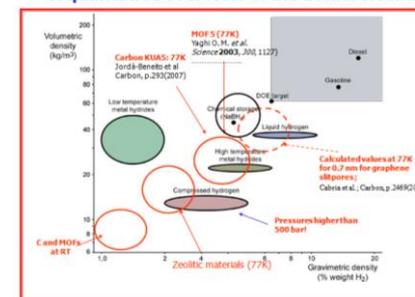
Bio-inspired MOFs per l'adsorbimento e l'attivazione della CO₂ in collaborazione con l'Università di Oslo.

Materiali per stoccaggio Idrogeno (stato solido SSH2S e Bor4store progetti EU)
materiali per lo stoccaggio di H₂ e CH₄,
materiali per la purificazione di H₂

Riferimenti: Giuseppe Spoto, Silvia Bordiga



A qualitative overview of the actual situation

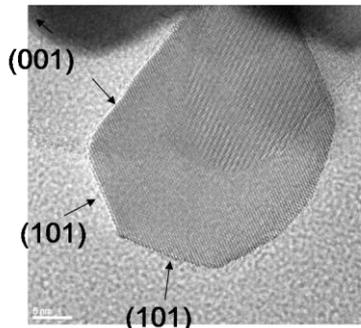
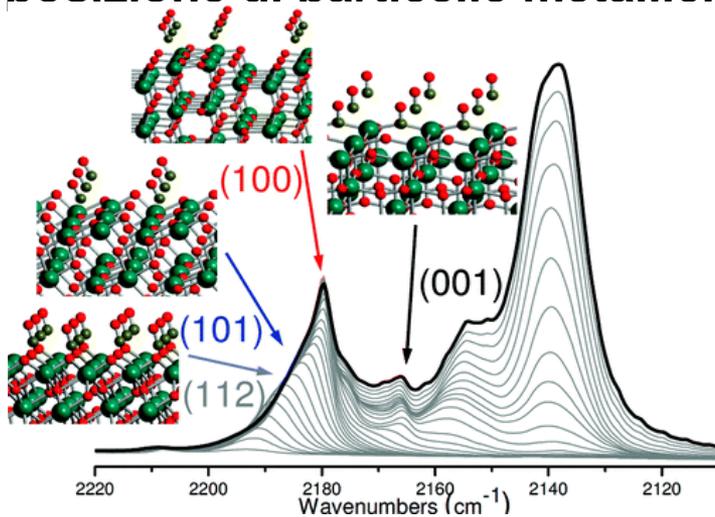


Increasing the Density of Adsorbed Hydrogen with Coordinative Unsaturated Metal Centers in Metal-Organic Frameworks

Yun Liu, Houria Kabbour, Craig M. Brown, Dan A. Neumann, and Channing C. Ahn
Langmuir, **2008**, 24 (9), 4772-4777

Ossidi nanostrutturati per catalisi e fotocatalisi:

- Studio delle relazioni tra struttura superficiale e reattività
- Modificazioni della superficie (coloring, sintesi *in situ* di molecole antenna)
- Deposizione di particelle metalliche per *enhancement* Raman e IR



Graphene Coating of TiO₂ Nanoparticles Loaded on Mesoporous Silica for Enhancement of Photocatalytic Activity

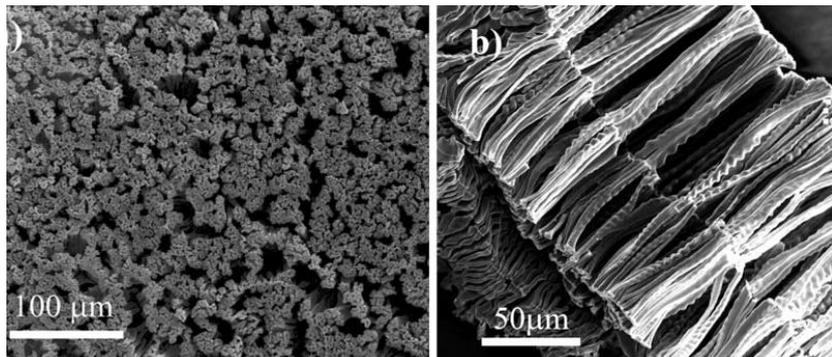
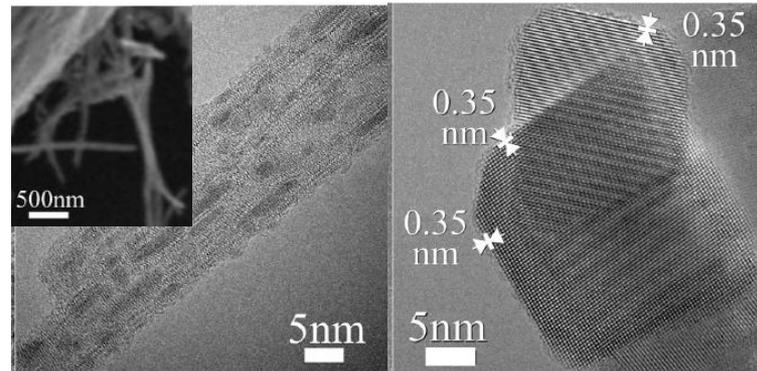
T. Kamegawa *et al.*, *J. Phys. Chem. C* 2010, 114, 15049

Materiali fotoattivi a base TiO_2 (nanotubi, microcolonne e microsferi)

per applicazioni nell'ambito della fotocatalisi (es. vernici) ed elettrodi per celle solari "DSSC"

- Sintesi dei materiali, microscopie (SEM, AFM, TEM), spettroscopie IR e UV-Vis, diffrazione raggi X, analisi porosimetriche, test fotocatalitici.

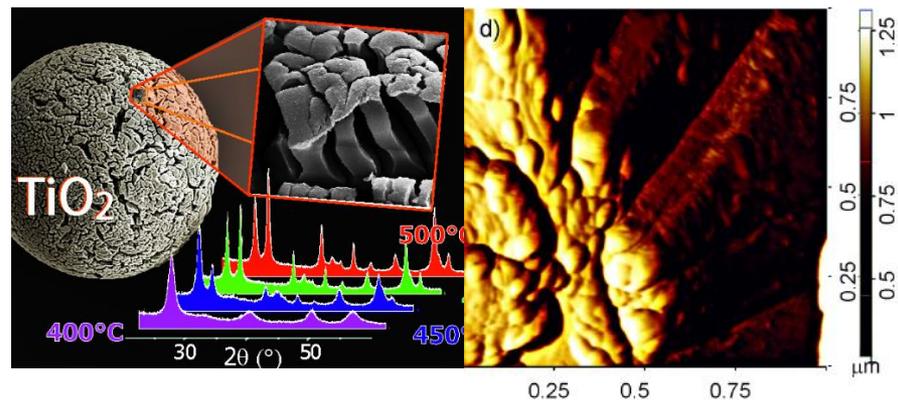
TiO_2 nanotubes loaded/doped with Ag, Au, graphenes:



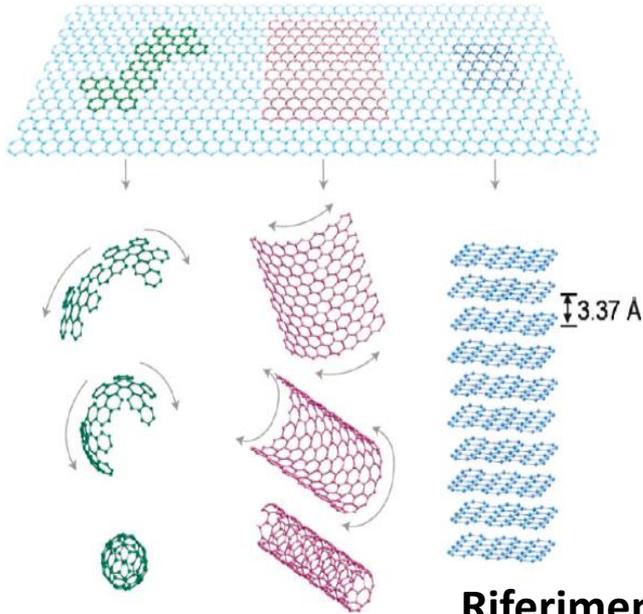
TiO_2 pillars

Riferimenti: **Domenica Scarano e Federico Cesano**

TiO_2 microspheres:



Compositi a base carbonio (nanotubi di carbonio, grafeni, grafite nanostrutturate)



Compositi contenenti **nanotubi di carbonio**, **grafeni** o **grafite nanostrutturata**, per applicazioni in sensoristica integrata per l'automotive o come materiali ablativi per il settore aerospaziale.

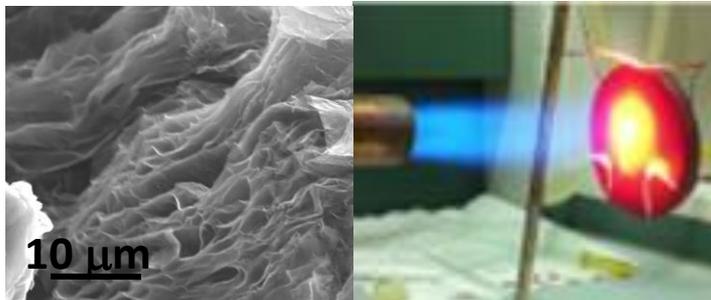
-Sintesi dei materiali, microscopie (SEM, AFM, TEM), diffrazione raggi X, analisi termiche (DSC, TGA), mappe di conducibilità, analisi porosimetriche, nanoindentazione.

Riferimenti: **Domenica Scarano e Federico Cesano**

CNT/LDPE
Composites:



STEPS - Sistemi e Tecnologie per l'Esplorazione Spaziale

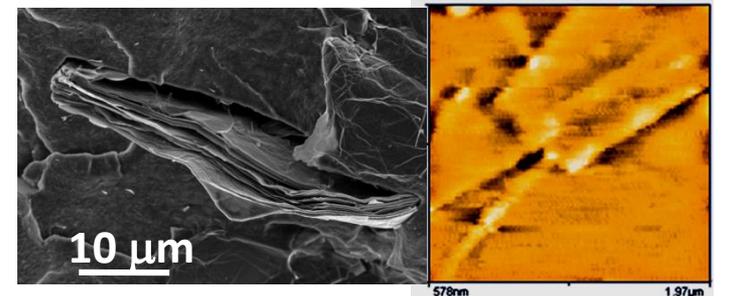
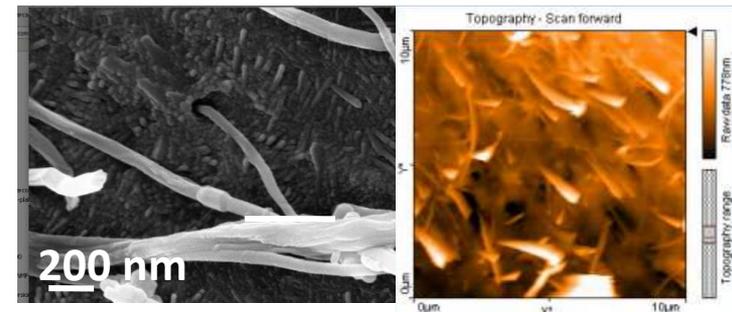


Exfoliated
graphite/polymer
composites



CENTRO
RICERCHE
FIAT

**Touch-sensitive
integrated devices**



Interazioni metallo – legante in soluzione:

formulazione di modelli di speciazione

determinazione di costanti termodinamiche di formazione

indagine strutturale

Docenti:

Prof. Pier Giuseppe Daniele

Dott.ssa Silvia Berto



La ricerca scientifica nel campo degli **equilibri in soluzione** prevede l'acquisizione di parametri termodinamici su soluzioni sintetiche e, talora, naturali allo scopo di ottenere un modello chimico dell'ambiente di reazione indagato.

I parametri così determinati possono essere impiegati in campi della scienza, quali la biologia molecolare, la geologia, le scienze ambientali, la chimica clinica, etc., in cui è spesso importante riuscire a distinguere tra le diverse forme chimiche in cui una specie di interesse può essere presente.

L'equilibrio chimico regola fenomeni come la ripartizione degli ioni metallici nei differenti comparti ambientali oppure la loro distribuzione e tossicità negli organismi viventi, i quali variano a seconda che i cationi siano liberi o legati a molecole organiche o inorganiche.



Speciazione in soluzione

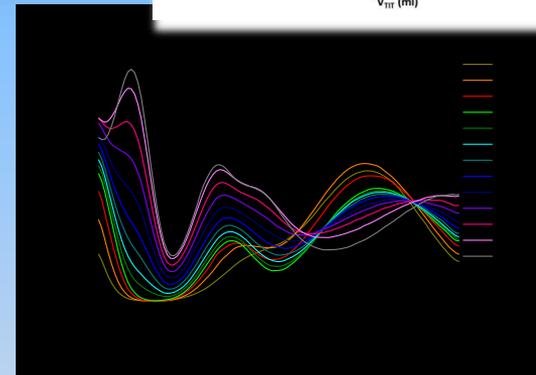
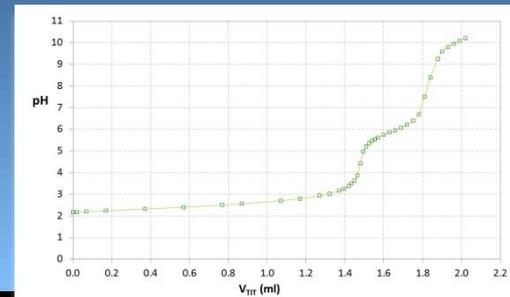
individuazione della composizione d'equilibrio di soluzioni acquose in funzione del pH

acquisizione di parametri termodinamici per ottenere un *modello chimico* dell'ambiente di reazione



tecniche analitiche che non perturbino le condizioni di equilibrio del sistema chimico

Potenziometria
Spettroscopie



si ottengono *stechiometria*, *stabilità* e *struttura* più probabile delle specie presenti in un miscuglio all'equilibrio chimico



METODO DI LAVORO

Software dedicati all'elaborazione di modelli chimici

Titolazioni potenziometriche
elettrodo combinato a membrana di vetro
o altri elettrodi iono-selettivi

Modello chimico:
stechiometria
stabilità

Software dedicati all'elaborazione di modelli chimici

Sistema a flusso per la registrazione di **spettri**
di **assorbimento molecolare** durante il
processo di titolazione potenziometrica

Modello chimico
Spettri delle singole specie

registrazione di spettri di emissione in fluorescenza e EPR o altre **tecniche spettroscopiche** per confermare il modello chimico e ottenere **informazioni strutturali** sulle specie in soluzione





IONE URANILE

dissoluzione e mobilità ambientale in funzione della presenza di leganti e di microrganismi

gestione e controllo delle scorie radioattive

valutazione dei meccanismi di trasporto dell'uranio in organismi viventi

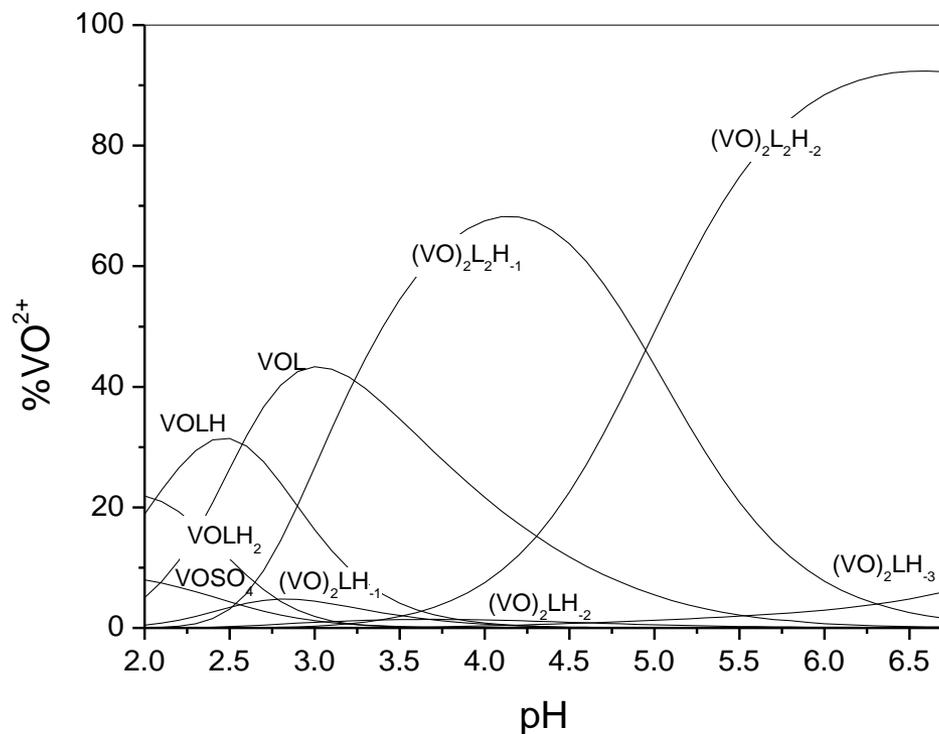


IONE VANADILE

Gli effetti di questo catione in **ambito biologico**, la sua bio-distribuzione, tossicologia e attività farmacologica dipendono dalla forma chimica in cui tale catione si trova e tali aspetti sono ritenuti di grande interesse dalla società scientifica.

controllo della tossicità e dell'attività farmacologica

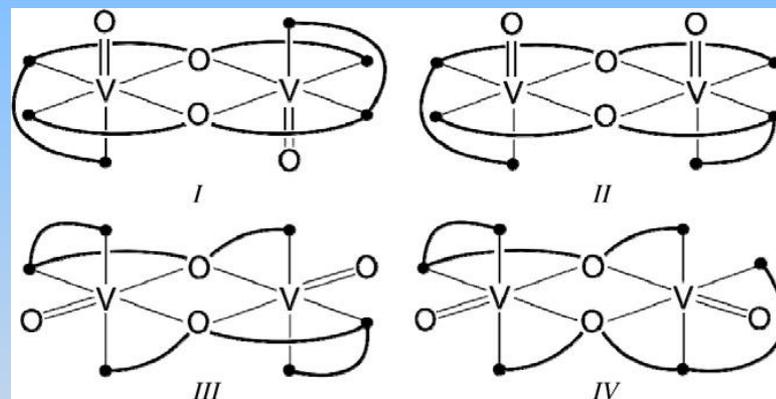




Distribution diagram of vanadyl-citric system for a solution with $C_M = 5$, $C_L = 5$ mmol L^{-1} ,



Schemes with the proposed binding modes for the dimeric complexes ($\text{M}_2\text{L}_2\text{H}_{-2}$) of D(+)-*threo*-isocitric (I and II) and citric (III and IV) acids.

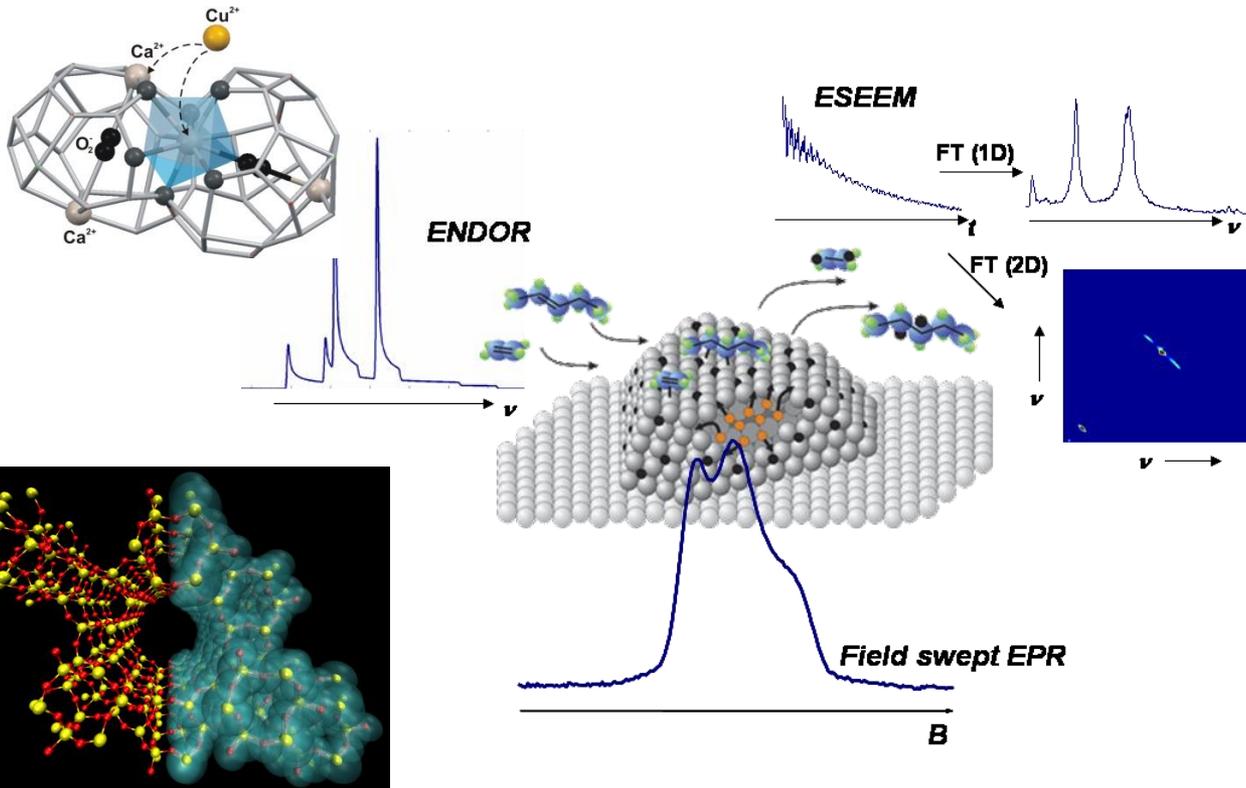


From: S. Berto, P. G. Daniele, E. Prenesti, E. Laurenti, "Interaction of oxovanadium(IV) with tricarboxylic ligands in aqueous solution: a thermodynamic and spectroscopic study", *Inorganica Chimica Acta*, 363 (2010) 3469-3476



Spettroscopia EPR applicata allo studio di solidi inorganici

Caratterizzazione e reattività di specie paramagnetiche e chimica di superficie di solidi ad elevato sviluppo superficiale.

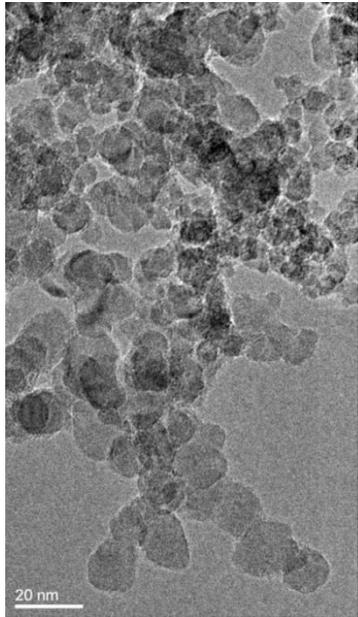


Struttura e reattività di ioni di metalli di transizione in sistemi porosi per applicazioni catalitiche

Caratterizzazione di intermedi di reazione di natura paramagnetica

Difetti nei solidi

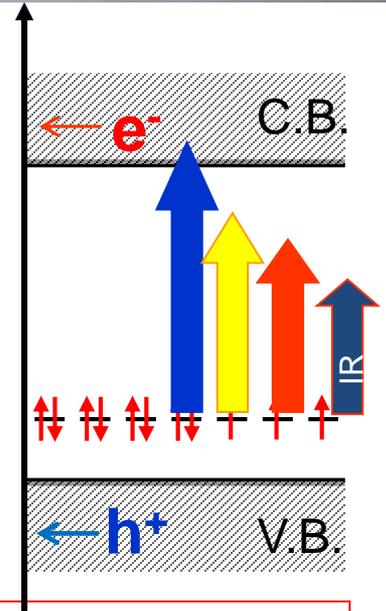
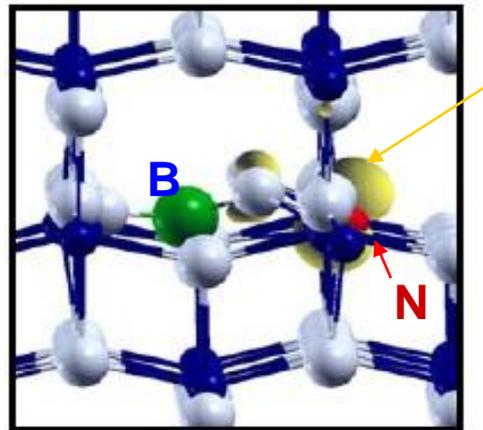
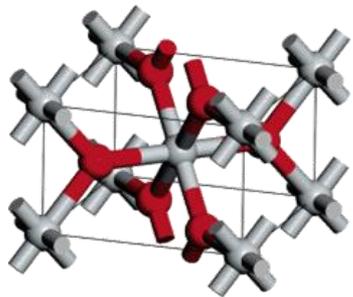
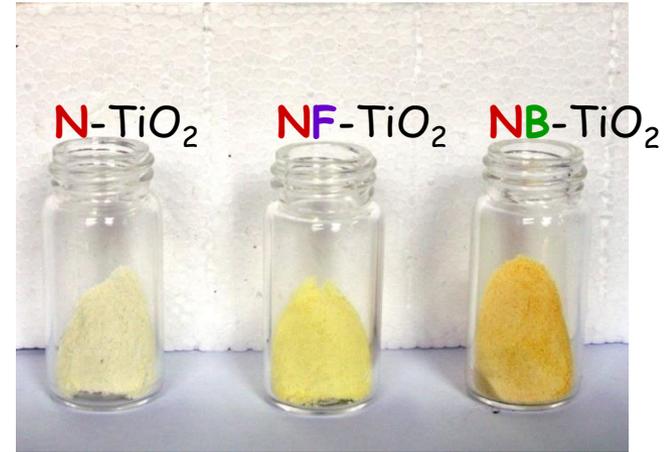
Sintesi e caratterizzazione di nuovi materiali fotoattivi a base di ossidi semiconduttori



Modificazioni superficiali di biossido di titanio

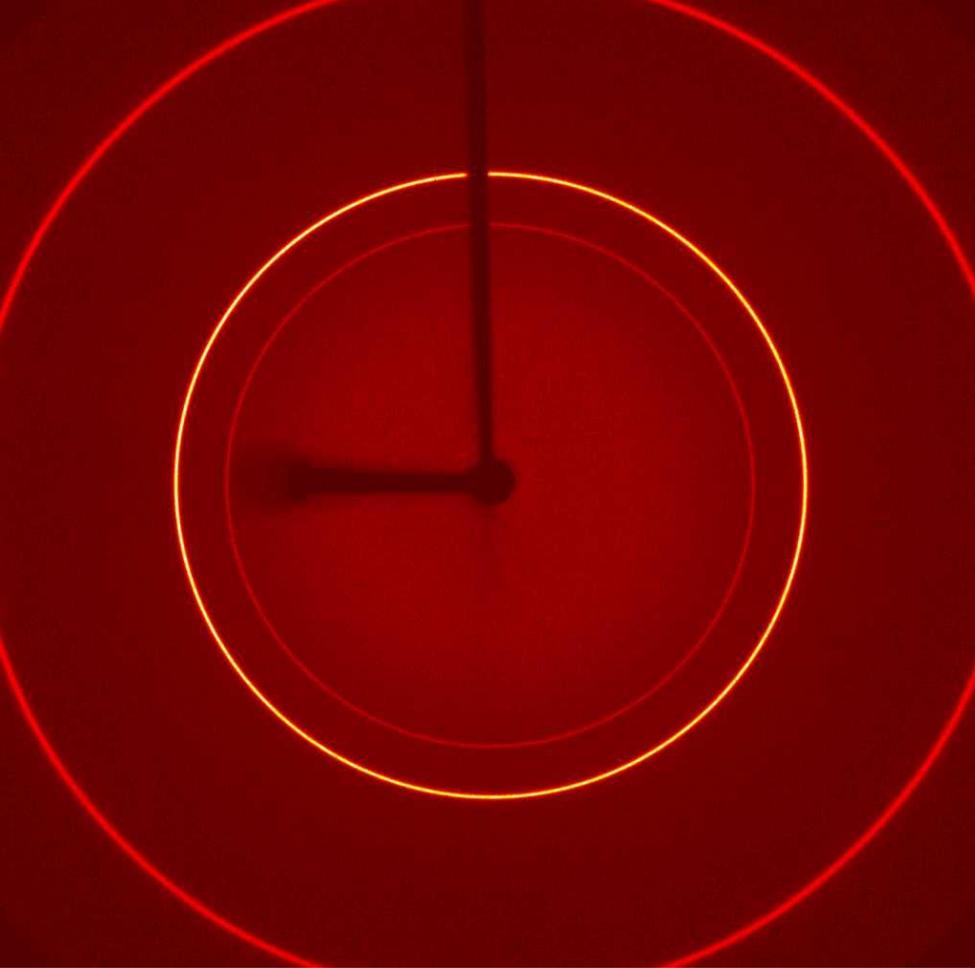
Drogaggio di biossido di titanio e di altri ossidi semiconduttori

Ossidi misti ed eterogiunzioni ossido-ossido



Metodologia: Sintesi (Sol-gel, CVD, spray pirolisi, idrotermale) di solidi inorganici, Caratterizzazione spettroscopica (EPR, UV-Vis-NIR, IR, XRD).
Proprietà fotofisiche e fotochimiche in luce visibile (o solare)

APPLICAZIONI FORENSI DELLA DIFFRAZIONE DEI RAGGI X



Combinazione della tecnica di
diffrazione da polveri con
quella di diffrazione da
cristallo singolo



I vantaggi della diffrazione dei raggi X rispetto ad altre tecniche per l'analisi forense sono:

- la capacità di distinguere tra gli elementi ed i loro ossidi
- la possibilità di identificare i composti chimici, le forme polimorfe e i cristalli misti
- la non distruttività del campione
- la semplicità di montaggio del campione
- la velocità della risposta (10-30 secondi)
- possibilità di misura direttamente sul supporto investigativo



Complessi dei Metalli di Transizione



- *Proprietà fotofisiche e fotoelettrochimiche: Luminescenza e OLED*
- *Fotosintesi artificiale, water-splitting.*
- *MOF*

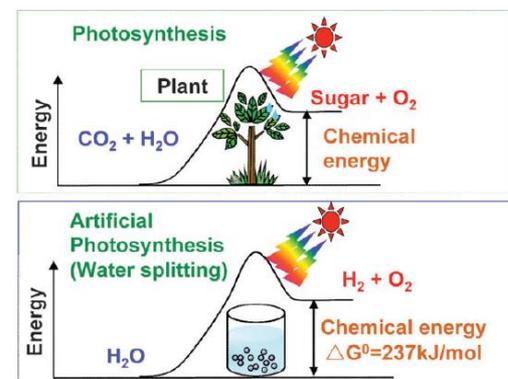
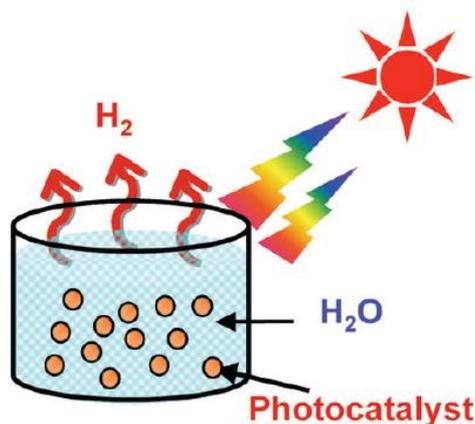
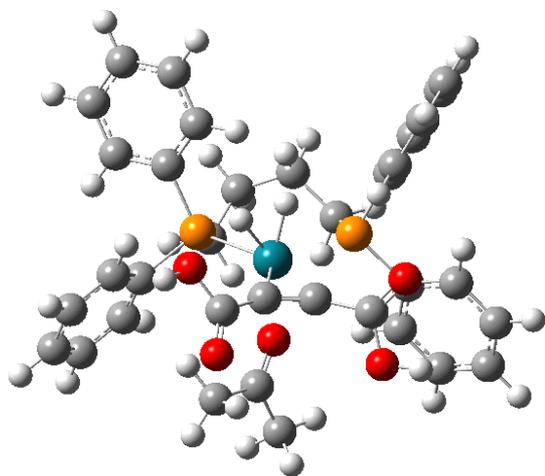


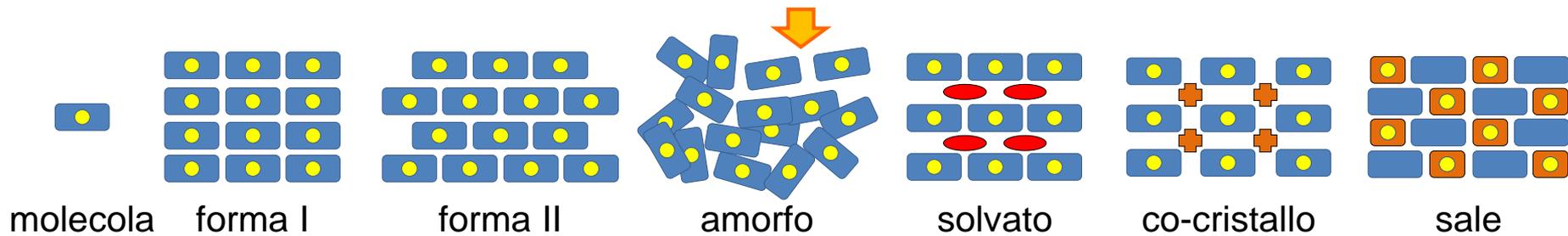
Fig. 2 Photosynthesis by green plants and photocatalytic water splitting as an artificial photosynthesis.

metodo: sintesi dei complessi, proprietà fotofisiche

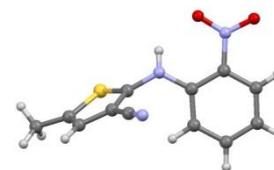
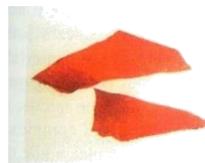
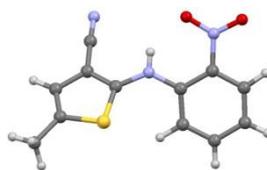
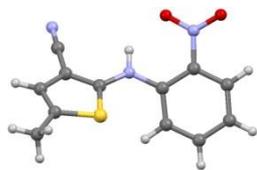
strumenti: linux workstation, potenziostato, fluorimetro, NMR,...

pre-requisiti: conoscenze computazionali di base, capacità sintetiche sperimentali e strumentali **da apprendere durante la tesi**

Polimorfismo, co-cristalli e sali



- *Proprietà microscopiche (impaccamento, conformazioni, legami a idrogeno...)*
- *Proprietà macroscopiche (punti di fusione, stabilità, biodisponibilità...)*

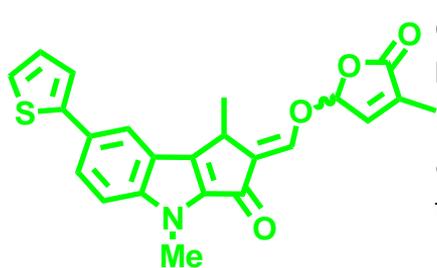


metodo: cristallizzazioni, meccanochimica

caratterizzazione: NMR allo stato solido, IR/Raman, raggi X (cristallo singolo e polveri), DSC/TGA

applicazioni: industria farmaceutica, industria dei coloranti, industria alimentare, industria degli esplosivi

Target oriented synthesis

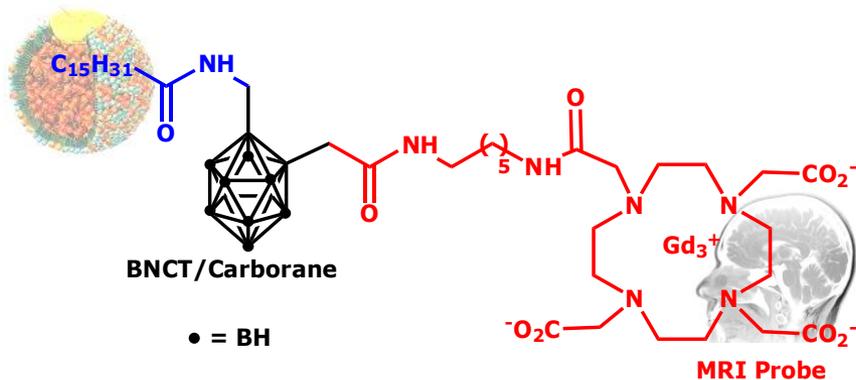


STRIGOLATTONI

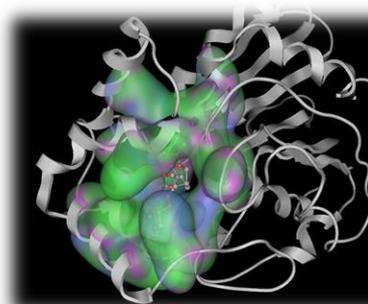
ormoni vegetali
biofertilizzanti, agricoltura sostenibile

agenti antitumorali
test in vivo

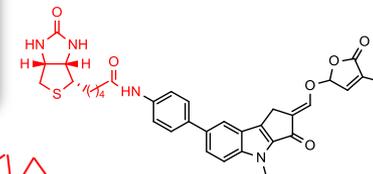
Biological vector



Recettore



BODIPY-SLs

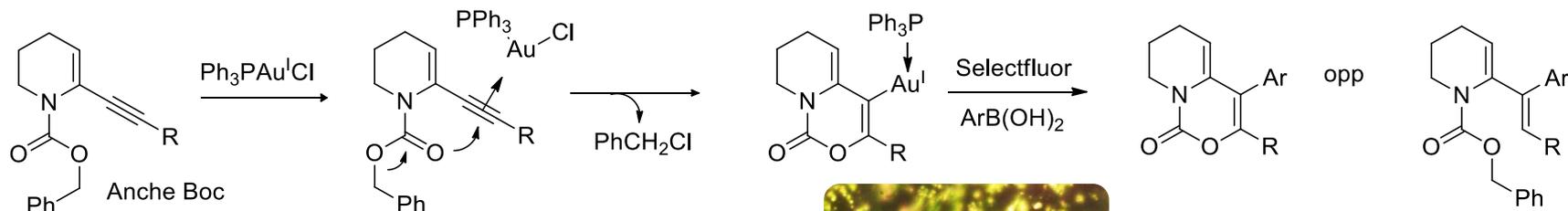


Biacore-

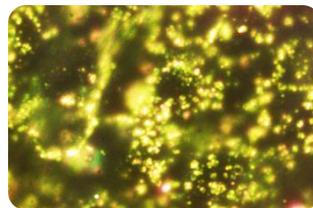
Sintesi di agenti duali BNCT (Boron Neutron Capture Therapy) / MRI

In collaborazione con il gruppo del Prof. Aime

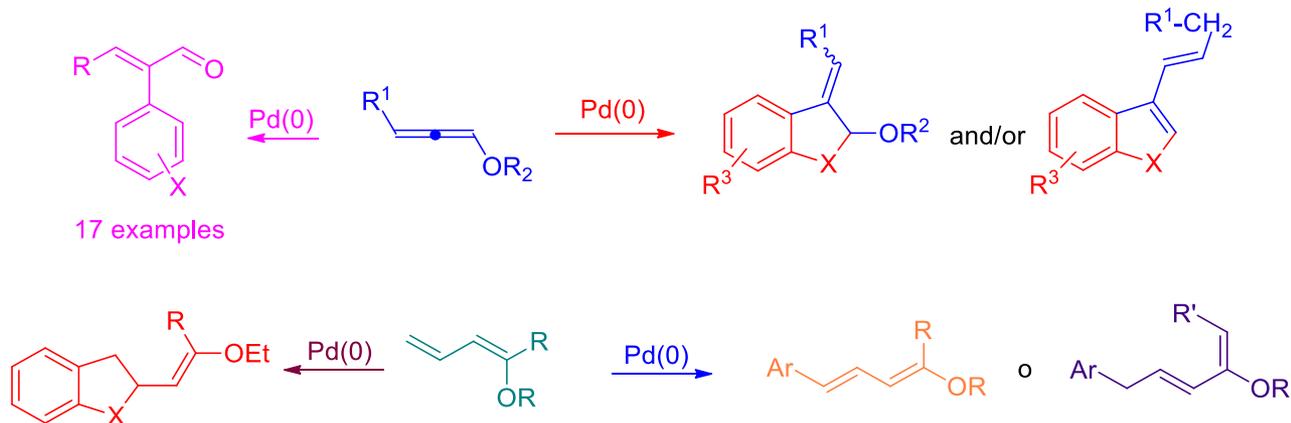
Catalisi da metalli di transizione, oltre il premio Nobel...



Reazioni di cross-coupling catalizzate da nanoparticelle di oro



Studio della reattività di alcosidieni in presenza di Pd(0) per la sintesi di strutture complesse

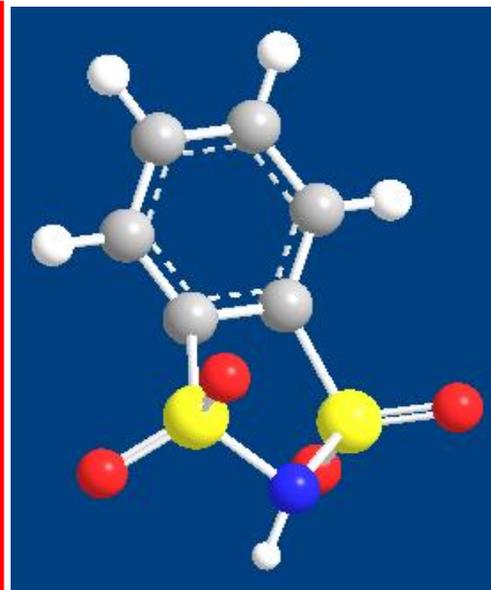


MARGHERITA BARBERO, SILVANO CADAMURO, STEFANO DUGHERA

Nuove metodologie in sintesi organica

CATALISI

- *STUDI ED APPLICAZIONI DI CATALIZZATORI ORGANICI RICICLABILI IN REAZIONI ACIDO- CATALIZZATE IN CONDIZIONI DI CATALISI OMOGENEA ED ETEROGENEA*
- *SINTESI DI NUOVI CATALIZZATORI CHIRALI*
- *STUDI SU REAZIONI ORGANICHE CATALIZZATE DA ORO*
- *SINTESI DI NUOVI LEGANTI PER COMPLESSI DEL V(IV)*



Metodologia: *Tecniche classiche ed avanzate di sintesi organica*

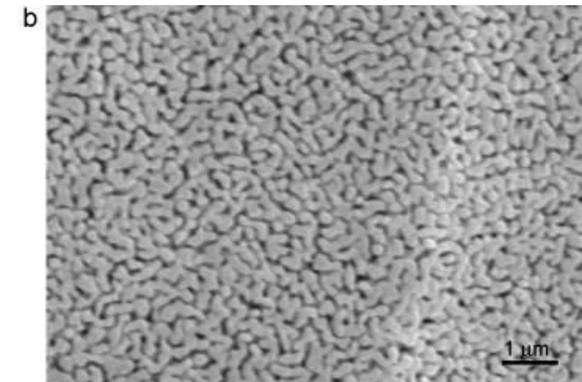
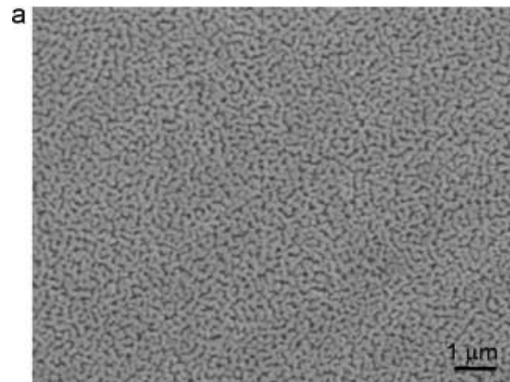
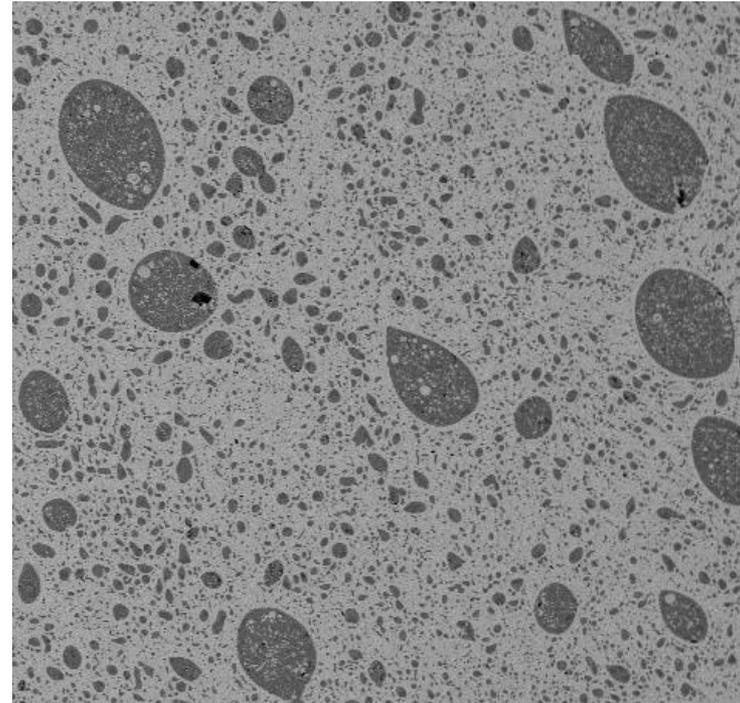
Strumentazione: *Gas-cromatografo, Spettrofotometro IR, Spettrometro di Massa, Spettrometro NMR*

Pre-requisiti: *Conoscenze di base sulla reattività e la determinazione strutturale di composti organici, da approfondire durante la tesi*

Argomenti di tesi

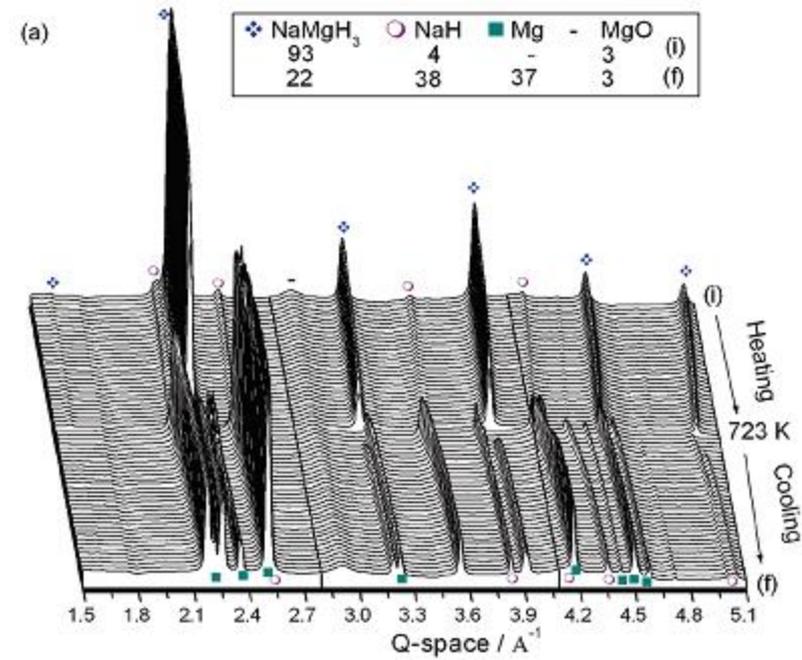
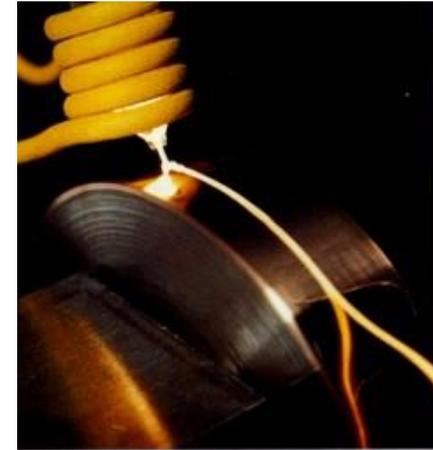
<http://momo.ch.unito.it/>

- **Termodinamica e cinetica delle trasformazioni di fase in metalli e leghe**
- **Materiali (idruri complessi, boro-idruri, amidi e imidi di Li e Mg) per lo stoccaggio di idrogeno**
- **Materiali termoelettrici**
- **Dealligazione e proprietà elettrochimiche di leghe metalliche (metalli nanoporosi)**



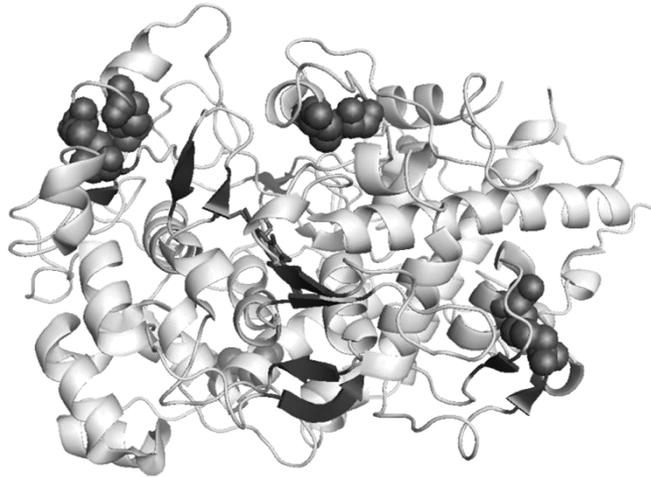
Tecniche sperimentali e di calcolo

- Preparazione di leghe mediante tecniche di non equilibrio
- Diffrazione di raggi X
- Microscopia ottica ed elettronica (SEM & TEM)
- Calorimetria
- Misure di assorbimento/desorbimento di H_2
- Misure di polarizzazione, potenziostatiche, galvanostatiche, OCV
- Termodinamica e cinetica di trasformazioni di fase mediante metodo di calcolo CALPHAD





Caratterizzazione strutturale e funzionale di enzimi mediante misure spettroscopiche e saggi di attività



- Preparazione e caratterizzazione funzionale di enzimi immobilizzati (perossidasi, lipasi, laccasi) per applicazioni biotecnologiche;
- Studi strutturali e funzionali di enzimi in soluzione o adsorbiti su supporti solidi mediante l'uso concertato di tecniche spettroscopiche (spettroscopia UV-Vis, dicroismo circolare, spettroscopia EPR associata allo spin-labeling e allo spin-trapping): studi di dinamiche conformazionali e stabilità di proteine (unfolding)
- Caratterizzazione spettroscopica di complessi bioattivi di vanadio e rame mediante spettroscopia elettronica ed EPR

Strumentazione: Spettrometro EPR-CW, spettrofotometro UV-Vis, dicroismo circolare, elettroforesi

Pre-requisiti: Biochimica

Titolo: Sintesi e caratterizzazione di materiali polimerici e ibridi stimuli responsive per applicazioni di drug delivery

Proponente: Dott.ssa Valentina Brunella

Eventuali partnership: Università di Santiago de Compostela, Spagna

Contesto conoscitivo/applicativo di riferimento:

Il comportamento termico di alcuni materiali polimerici, che cambiano conformazione e solubilità in funzione della temperatura d'esercizio, può essere sfruttato per controllare il rilascio di molecole attive.

Obiettivi scientifici

Modificare ossidi mesoporosi con polimeri thermo-responsive al fine di ottenere materiali ibridi in cui è possibile governare l'apertura e la chiusura dei pori mediante variazioni, anche minime, di temperatura. Materiali di questo tipo sono di grande interesse per le possibili applicazioni nel rilascio controllato di farmaci.

Metodologie di lavoro

Sintesi: polimerizzazioni radicaliche, funzionalizzazioni.

Caratterizzazioni: spettroscopia FTIR, NMR, analisi cromatografiche, analisi termiche, microscopie elettroniche.

Titolo: Preparazione e caratterizzazione di membrane mesoporose e templanti polimerici mediante processi di auto-organizzazione di copolimeri a blocchi

Proponente: dott.sse Dominique Scalarone, Valentina Brunella

Eventuali partnership: Università di Santiago de Compostela, Spagna

Contesto conoscitivo/applicativo di riferimento:

La capacità dei copolimeri a blocchi di auto-organizzarsi in nanostrutture definite, tipo sfere, cilindri e lamelle, li rende materiali ideali per applicazioni nelle nanotecnologie.

Obiettivi scientifici

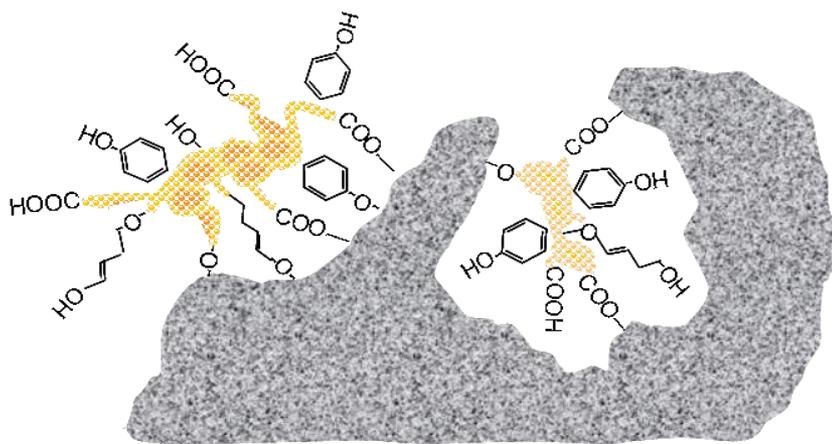
Ottenere membrane mesoporose polimeriche e/o membrane ossidiche per templaggio di strutture polimeriche con porosità controllata, modulabile e possibilmente con elevato ordinamento, da utilizzare in processi di cristallizzazione e nel trasporto controllato di specie chimiche.

Metodologie di lavoro

Preparazione di film polimerici nanostrutturati e loro trattamento termico, chimico e con radiazioni. Caratterizzazione morfologia tramite microscopie a forza atomica ed elettroniche. Caratterizzazioni spettroscopiche e analisi termiche.

Stabilizzazione chimico-fisica della sostanza organica del suolo

Effetto sulla disponibilità dei nutrienti



Effetto sull'emissione di gas serra



Metodologia: *Frazionamento chimico e densimetrico della sostanza organica*

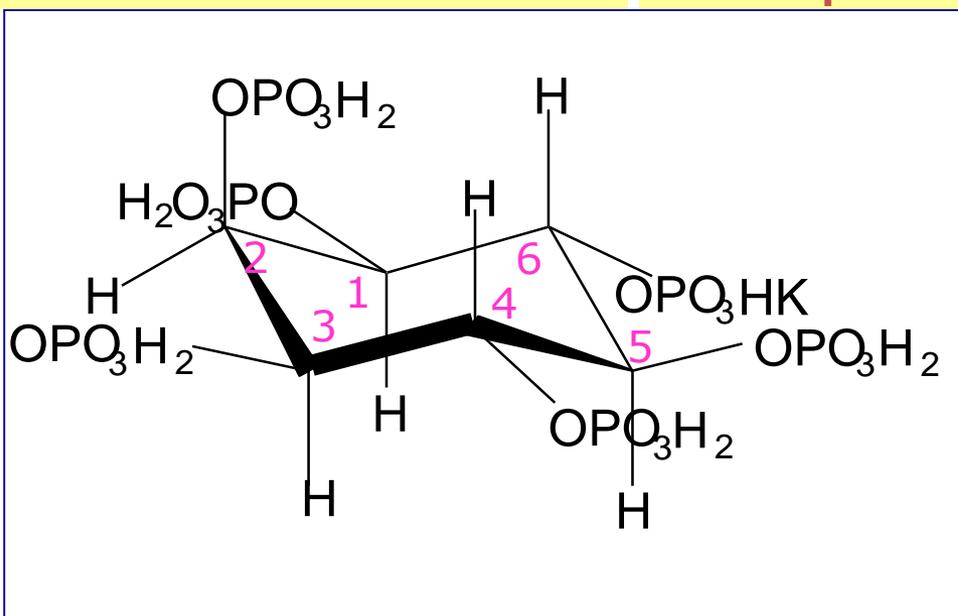
Strumentazione: *^{15}N e ^{13}C NMR, EA-IRMS*

Pre-requisiti: *Chimica del suolo, Chimica organica*

Interazione di inositol fosfati con superfici inorganiche

Effetto della proprietà di superficie sulle cinetiche di adsorbimento

Competizione con contaminanti del suolo per le superfici di adsorbimento

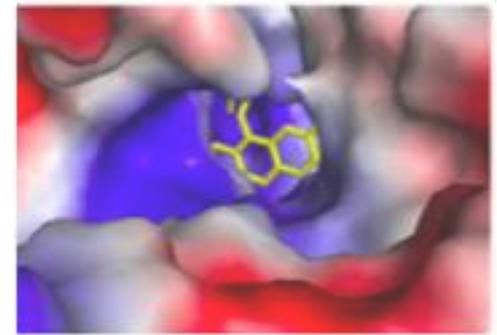


Metodologia: isoterme e cinetiche di adsorbimento

Strumentazione: XRD, FT-IR, DLS-PCS, Cromatografia ionica

Pre-requisiti: Chimica del suolo, Chimica organica

Structural and functional biochemistry



Prof. Gianfranco Gilardi – Dr. Sheila Sadeghi
www.biochemistry-scienze.unito.it

- Sviluppo di una piattaforma biotecnologica per lo screening di nuove entità chimiche
- Scoperta e ingegnerizzazione di nuovi biocatalizzatori per la bioremediation
- Disegno razionale di enzimi idrolasici per la produzione di un biosensore ottico
- Polimorfismo nell'aromatasi e morbo di alzheimer
- Cristallografia a raggi x per la determinazione della struttura di proteine di interesse biotecnologico

