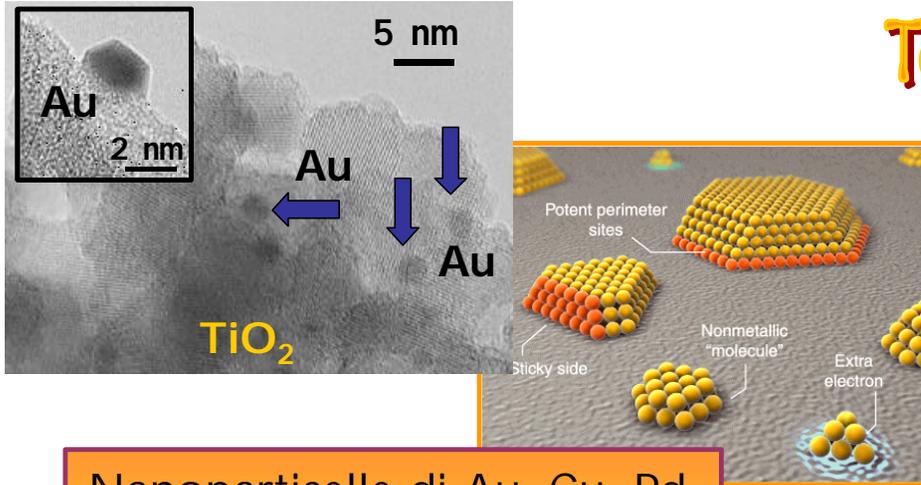


Caratterizzazione di sistemi nanostrutturati per catalisi ambientale

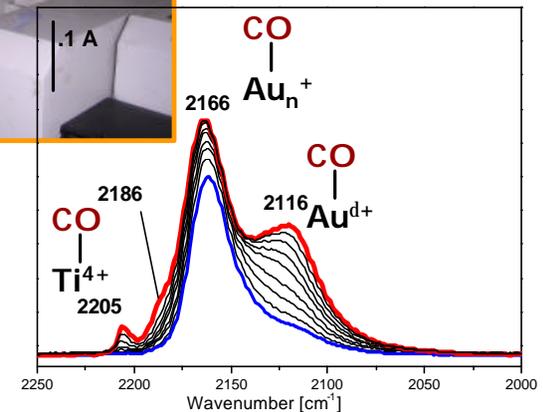


Tecniche di caratterizzazione

Spettroscopia (FT-IR, Uv-Vis), sia in statico che in flusso (OPERANDO)
Microscopia (HRTEM, SEM)
Tecniche calorimetriche

Nanoparticelle di Au, Cu, Pd
lega Au/Pd
supportate su ossidi
(CeO_2 , ZrO_2 , TiO_2)

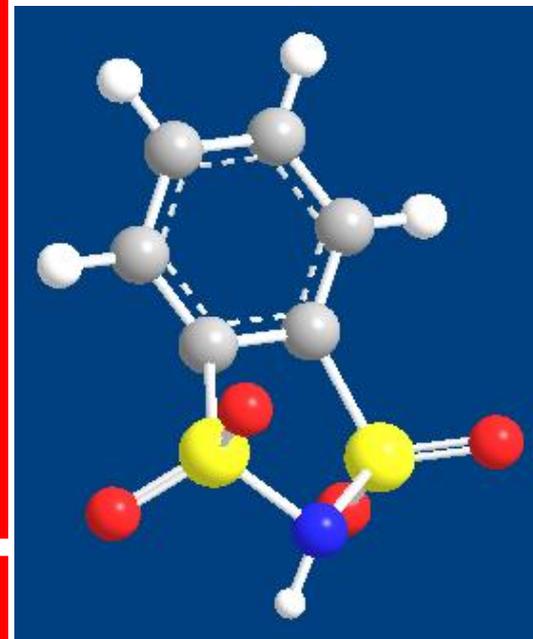
Produzione e purificazione di H_2
Sintesi H_2O_2



Nuove metodologie in sintesi organica

CATALISI OMOGENEA

- *STUDI ED APPLICAZIONI DI NUOVI CATALIZZATORI ORGANICI RICICLABILI IN REAZIONI ACIDO- CATALIZZATE*
- *STUDI SU REAZIONI CATALIZZATE DA PALLADIO TRA ELETTROFILI ORGANICI E COMPOSTI ORGANOMETALLICI*



SINTESI DI NUOVI CATALIZZATORI CHIRALI

Metodologia: *Tecniche classiche ed avanzate di sintesi organica*

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

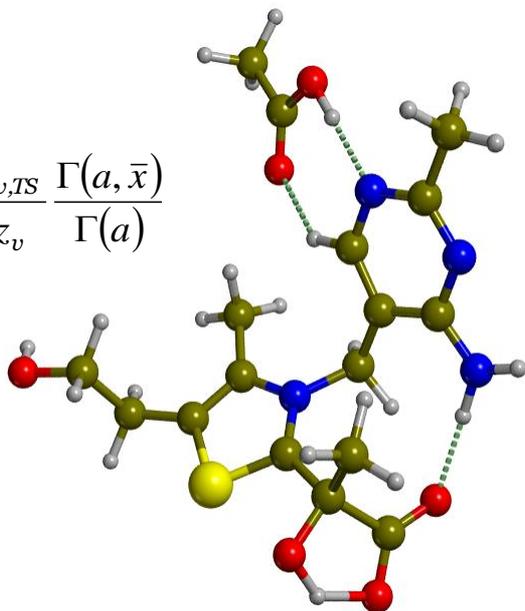
Pre-requisiti: *Conoscenze di base sulla reattività e la determinazione strutturale di composti organici, da approfondire durante la tesi*

Studi teorici sulla catalisi enzimatica

Meccanismi di Reazione

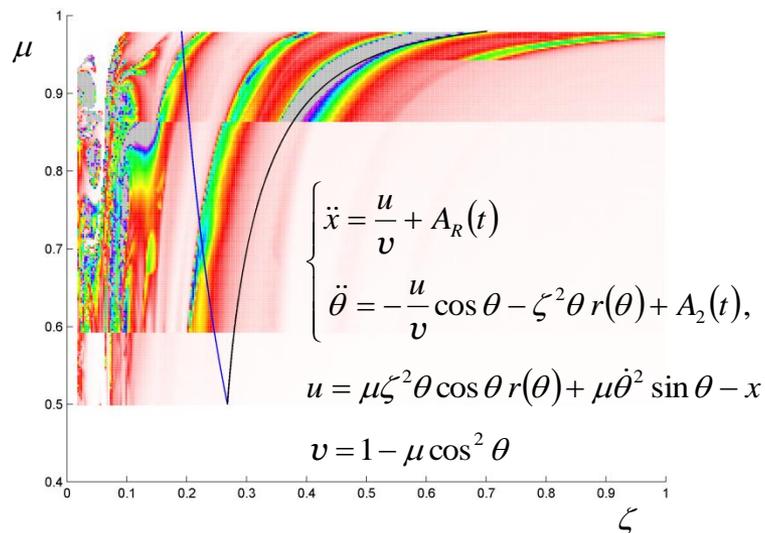
Caratterizzazione della superficie di energia potenziale di reazioni catalizzate da enzimi

$$k_a(\bar{x}) = \nu \frac{z_{v,TS}}{z_v} \frac{\Gamma(a, \bar{x})}{\Gamma(a)}$$



Dinamica di Sistemi Complessi

Termodinamica ed evoluzione temporale di sistemi non lineari



Metodologia: *Chimica computazionale, programmazione, sviluppo di modelli.*

Strumentazione: *Calcolatore (Gaussian-03, MATLAB, MATHCAD)*

Pre-requisiti: *Meccanismi di reazione, Fisica, Matematica, Termodinamica statistica*

Applicazioni analitiche di recettori artificiali



Polimeri a stampo molecolare¹

I polimeri a stampo molecolare (MIPs, molecularly imprinted polymers) sono recettori artificiali preparati mediante la sintesi di una matrice polimerica in presenza di una molecola capace di agire da “stampo”. Le nanocavità originate da questo processo mostrano proprietà di riconoscimento molecolare in analogia con i recettori naturali (anticorpi, enzimi, recettori di membrana)



Librerie peptidiche combinatoriali²

Peptidi con proprietà di riconoscimento molecolare verso molecole “target” possono essere preparati mediante lo sviluppo di librerie combinatoriali in fase solida. La rapida identificazione della sequenza con le migliori proprietà leganti può essere ottenuta attraverso un approccio “evolutivo” alla sintesi della libreria



Applicazioni: sviluppo di sistemi di cattura per analiti di interesse alimentare (es.micotossine), ambientale (es.pesticidi) e clinico (es.ormoni steroidei)

Per ulteriori informazioni: claudio.baggiani@unito.it
<http://www.chimica-analitica.unito.it/bioanalitica/labac.htm>

1. C.Baggiani et.al.: “Solid phase extraction of food contaminants using molecular imprinted polymers” - *Anal.Chim.Acta*, 2007, 591, 29-39; C.Baggiani et.al. “Molecular imprinted polymers as synthetic receptors for the analysis of myco- and phyco-toxins” - *Analyst*, 2008, 133, 719-30
2. C.Tozzi et.al.: “Synthetic peptides as artificial receptors towards proteins from genetically modified organisms”, *Biosens.Bioelectron.*, 2008, 24, 493-97 ; G.Giraudi et.al.: “Solid-phase extraction of ochratoxin A from wine based on a binding hexapeptide prepared by combinatorial synthesis” - *J.Chromatogr.A*, 2007, 1175, 174-80

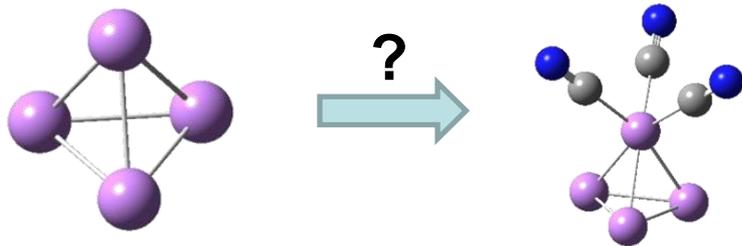
Addotti molecolari metallorganici

Materiali molecolari

Preparazione di addotti supramolecolari attraverso building-block organometallici

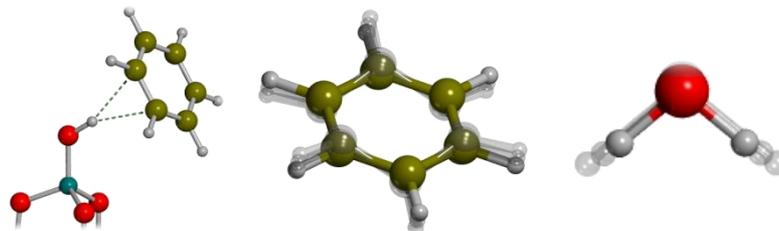
Modellazione di nuove molecole

Studio computazionale di stabilità di nuove specie molecolari dell'arsenico



Crystal engineering

Studio e modellazione delle interazioni a idrogeno "deboli"



Sintesi inorganica

Sintesi con tecniche a vuoto. Caratterizzazione strutturale con metodi spettroscopici

Metodologia: Sintesi metallorganica. Spettroscopia Vibrazionale e elettronica. Gaussian-03

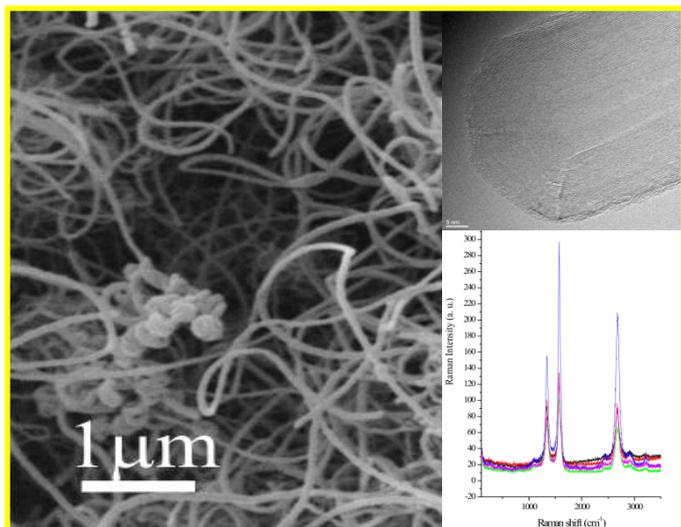
Strumentazione: Laboratorio sintetico, Spettrofotometro FT-IR, Raman, UV-VIS-NIR

Pre-requisiti: buona preparazione chimica di base

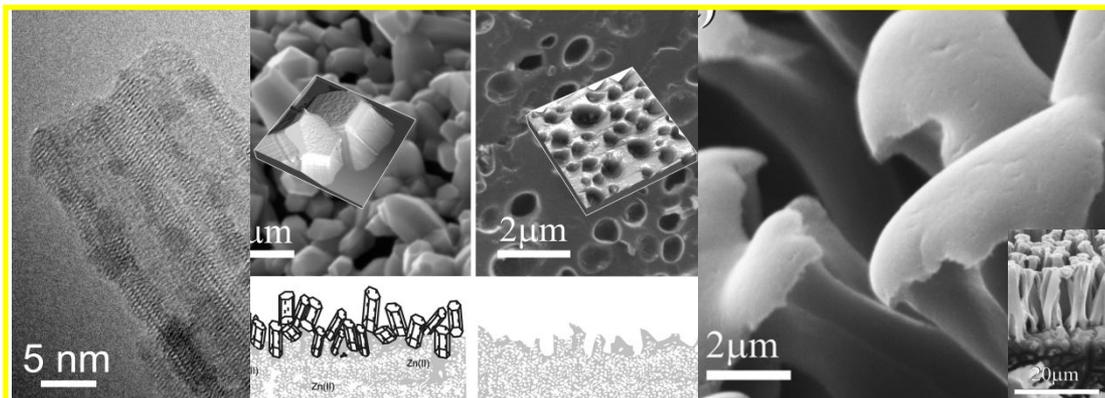


Argomenti tesi laurea magistrale MCA: Domenica Scarano

*Compositi conduttivi a base di **nanotubi di carbonio** per applicazioni sensoristiche (collaborazione CRF)*



*Sintesi e caratterizzazione morfologico-strutturale a partire da precursori inorganici e organici di: a) **ossidi nanostrutturati**; b) **compositi ibridi ossido-carbonio**; c) **carboni porosi** per applicazioni fotocatalitiche e celle solari (coll. Regione Piemonte, BASF).*



Metodologia: *Metodi di sintesi (CVD, Laser irradiation, idrotermale) e tecniche di caratterizzazione*

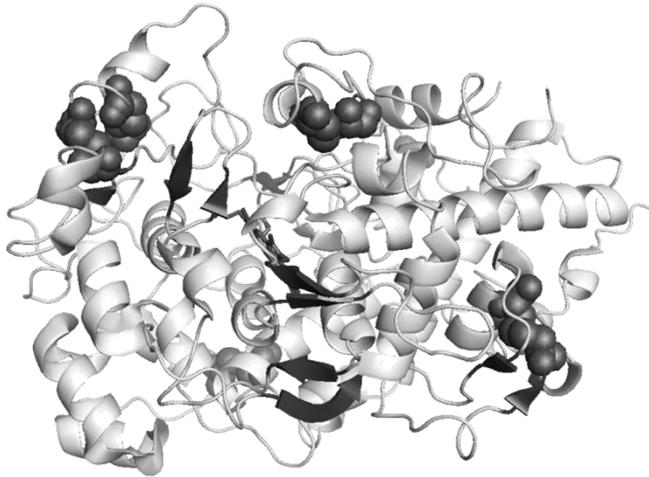
Strumentazione: *Spettrofotometri IR, Raman, UV-vis, Microscopi SEM, HRTEM e AFM, XRD, BET, forno di sintesi.*

Pre-requisiti: *Chimica fisica, elementi di stato solido, catalisi, spettroscopia molecolare, strutturistica, microscopie.*



Argomenti tesi laurea magistrale MCA: Elena Ghibaudi

Studio delle dinamiche conformazionali e caratterizzazione funzionale di enzimi mediante misure spettroscopiche e saggi di attività



- Caratterizzazione funzionale di enzimi (lipasi, proteasi, ecc.) immobilizzati su nanospugne di natura ciclodestrinica
- Studio di fenomeni di aggregazione proteica di lattoperossidasi mediati dallo stress ossidativo
- Caratterizzazione spettroscopica di intermedi di denaturazione di lattoperossidasi, mediante EPR in onda continua ed impulsato

Strumentazione: Spettrometro EPR-CW e impulsato, spettrofotometro UV-Vis, elettroforesi

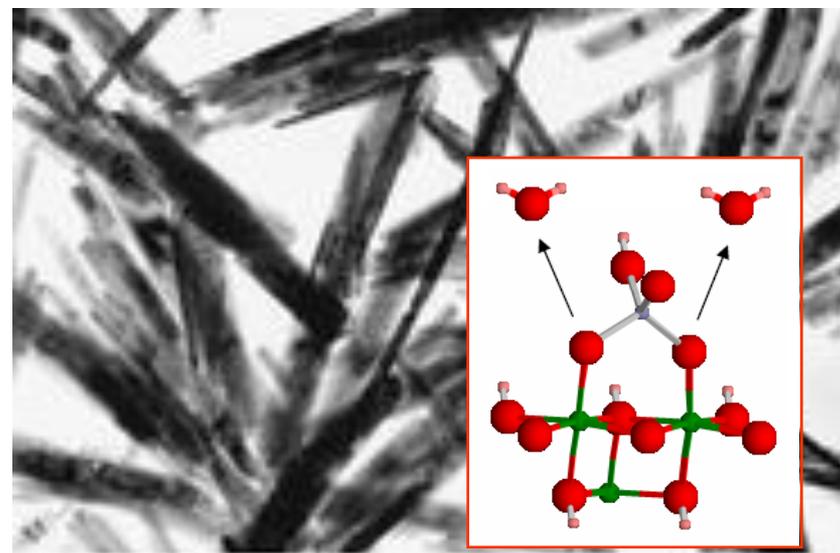
Pre-requisiti: Biochimica

Ciclo biogeochimico di biomolecole o di contaminanti

Effetto della gestione agroforestale



Competizione con contaminanti del suolo per le superfici di adsorbimento



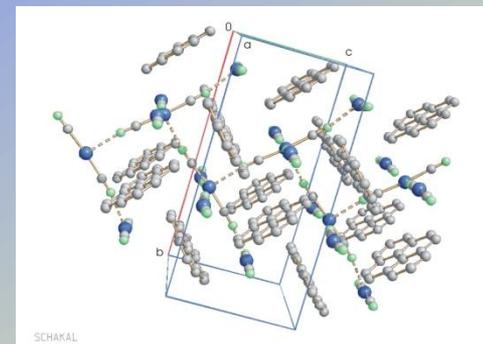
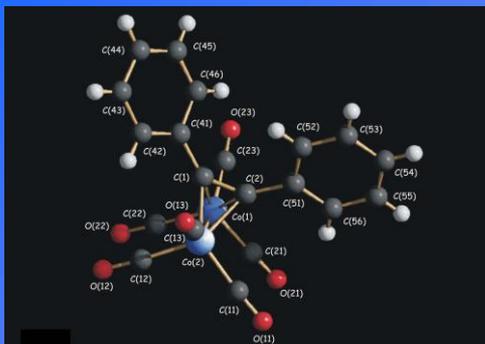
Metodologia: Caratterizzazione molecolare della sostanza organica del suolo, isoterme e cinetiche di adsorbimento

Strumentazione: XRD, FT-IR, DLS-PCS, ^{13}C NMR, GC-MS, Cromatografia ionica

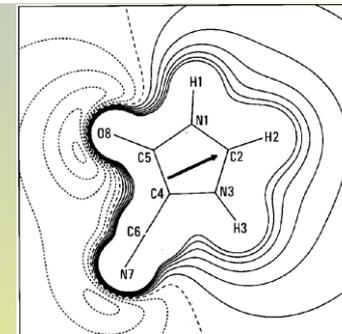
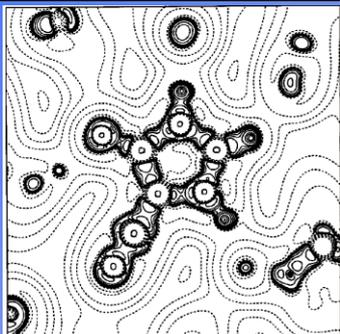
Pre-requisiti: Chimica del suolo, Chimica organica

Prof.ssa G. Gervasio
Dott.ssa D. Marabello

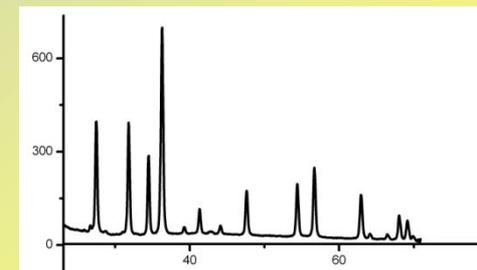
*Determinazione strutturale
di nuovi composti*



*Determinazione della densità
elettronica sperimentale e delle
sue proprietà*



*Identificazione di materiali
cristallini per la chimica forense*



Metodologia: Diffrazione dei raggi X da cristallo singolo e polveri cristalline.

Strumentazione: Diffrattometro a raggi X per cristallo singolo e polveri cristalline, Luce di Sincrotrone, Microscopio ottico stereoscopico, Microscopio ottico a trasmissione con luce polarizzata, banche dati organiche e inorganiche, calcolatori per l'analisi dei dati



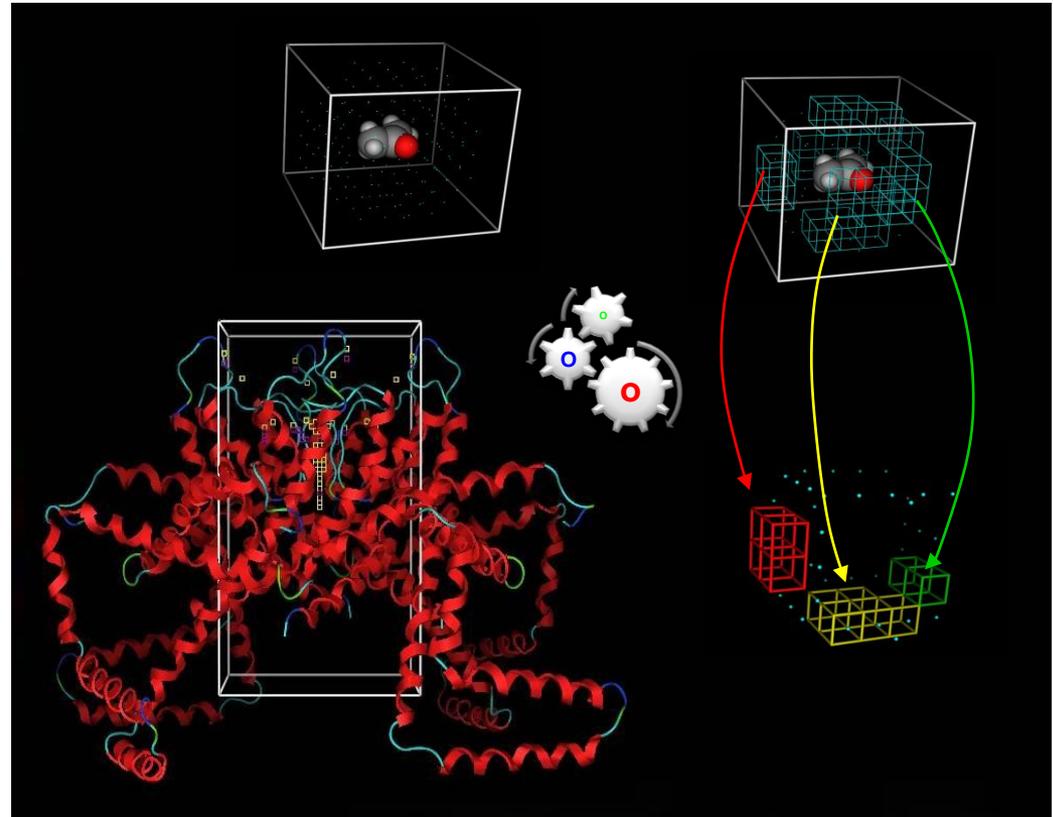
Studio in silico di biomolecole

Attività biologica

L'attività biologica di una molecola generalmente dipende dalla sua capacità di interagire con macromolecole presenti nell'organismo

Studio in silico

L'interazione può essere studiata mediante l'uso di strumenti informatici al fine di ottenere informazioni per la progettazione di nuove molecole



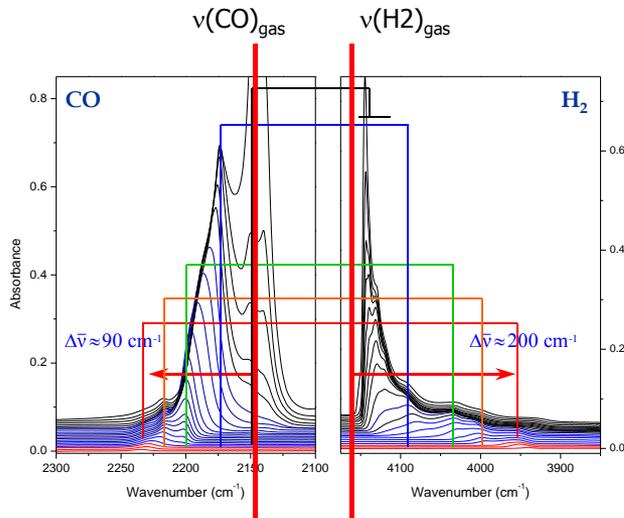
Metodologie: Modellistica molecolare, programmazione di applicazioni on-line

Strumentazione: Calcolatore

Pre-requisiti: Interesse per l'applicazione di tecniche computazionali a tematiche multidisciplinari a sfondo biologico (bio e chemoinformatica)

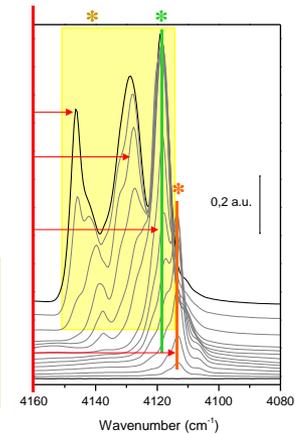
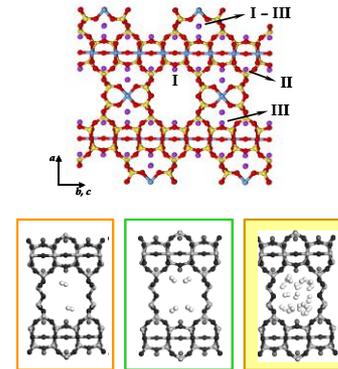
Argomenti tesi laurea magistrale MCA: Giuseppe Spoto

Uso dell'idrogeno come molecola sonda per studiare le superfici



Materiali microporosi per l'hydrogen storage

H₂ on ETS10



Metodologia: Preparazione e caratterizzazione morfologica e strutturale dei materiali, test delle proprietà di adsorbimento nei confronti di H₂ e di altre molecole sonda.

Strumentazione: spettroscopia IR in trasmissione a temperatura variabile da 300 a 20 K. Spettroscopie ottiche, microscopie, test volumetrici e gravimetrici di adsorbimento

Pre-requisiti: Buone conoscenze delle tecniche spettroscopiche ed in particolare dell'IR, conoscenza delle microscopie, delle tecniche volumetriche, pratica con i sistemi che lavorano in alto vuoto e con gas (anche in pressione).



- **Complessi Luminescenti** dei Metalli di Transizione
- **Boron Neutron Capture Therapy (BNCT)**
- **Elettrochimica Organometallica**
- **Studio del Polimorfismo Mediante NMR Stato Solido**
- **Molecole Iperpolarizzate per Applicazioni MRI**
- **Analisi Isotopiche su Matrici Naturali**

Applicazioni

Celle Solari, OLED, Sonde Bioconiugabili Luminescenti, Composti Antitumorali, Molecular Wire, Magnetic Resonance Imaging, Tracciabilità dei Prodotti Naturali, Polimorfismo dei Composti Farmaceutici

Tipologie di Lavoro Possibili

Sintesi organometalliche, Caratterizzazione mediante spettroscopia ottica ed NMR, Calcolo DFT, Reattività allo Stato Solido, Elettrochimica, Analisi di Matrici Naturali/Alimentari, Sintesi di Molecole Iperpolarizzate

Metodologia: *Sintesi organometallica, elettrochimica, spettroscopia.*

Strumentazione: *Spettrometri ottici, NMR, potenziostato, calcolatore.*

Pre-requisiti: *Chimica Inorganica, altri da apprendere durante la tesi.*

La nuova disciplina giuridica delle sostanze chimiche

Il Regolamento REACH

- *Procedure di registrazione, valutazione e autorizzazione delle sostanze chimiche*
- *Il ruolo dell'Agenzia Europea per le sostanze chimiche*

La normativa sulle sostanze chimiche pericolose

- *L'import – export di sostanze chimiche pericolose*
- *La classificazione, l'imballaggio e l'etichettatura delle sostanze pericolose*

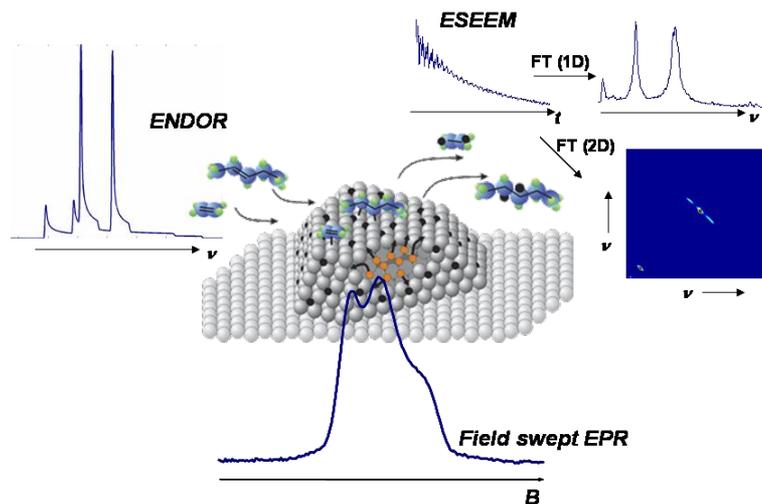
Metodologia: *Analisi normativa, ricerca giurisprudenziale*

Strumentazione: *Testi normativi, manuali e trattati di diritto pubblico, comunitario e dell'ambiente, (eventualmente) contatti con Unione Industriale di Torino e Agenzia Europea per le sostanze chimiche*

Pre-requisiti giuridici: *Fonti comunitarie e nazionali, atti e provvedimenti amministrativi*

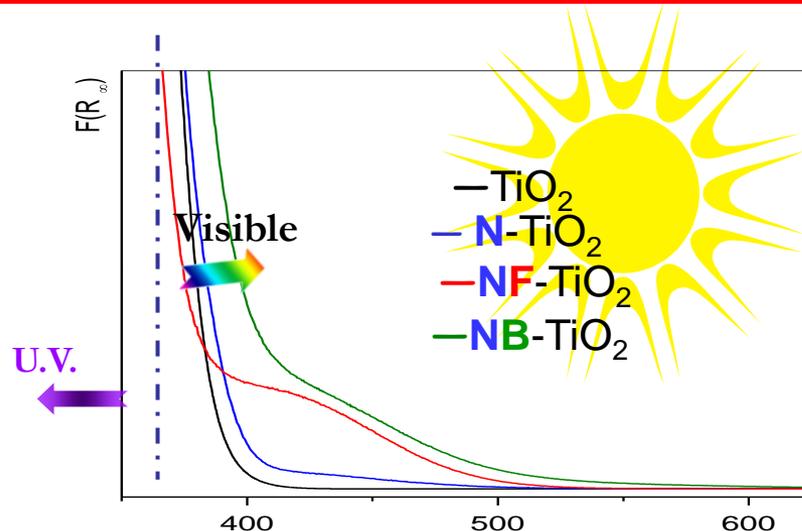
Pre-requisiti linguistici: *Conoscenza dell'inglese (per analisi di documentazione di provenienza UE ed eventuali contatti con l'Agenzia Europea per le sostanze chimiche)*

Spettroscopia EPR applicata allo studio di solidi inorganici



Caratterizzazione di difetti nei solidi (isolanti e semiconduttori), Chimica di superficie (solidi ad elevato sviluppo superficiale, zeoliti)

Sintesi e caratterizzazione di nuovi materiali fotoattivi in luce visibile (fotocatalisi, splitting acqua)



Doping di biossido di titanio e ossido di zinco con azoto e altri non metalli, ossidi misti e loro doping. Obiettivo: modificare la struttura elettronica per sfruttare i fotoni visibili del solare.

Metodologia: Sintesi (Sol-gel, CVD, spray pirolisi, mecano chimica) di solidi inorganici, Caratterizzazione spettroscopica (EPR, UV-Vis-NIR, IR, XRD)

Strumentazione: EPR in onda continua e impulsato, tecniche standard per caratterizzazione di solidi e superfici, linee alto vuoto.

Pre-requisiti: Corso di Risonanze Magnetiche.

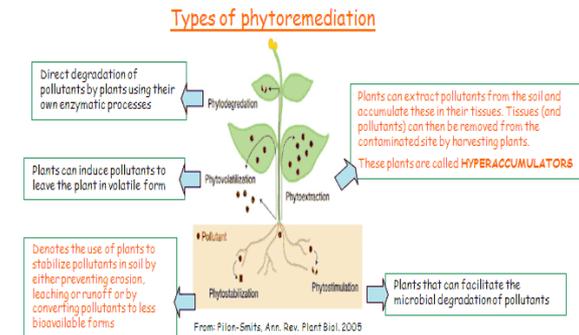
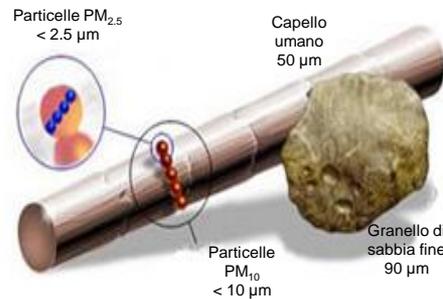
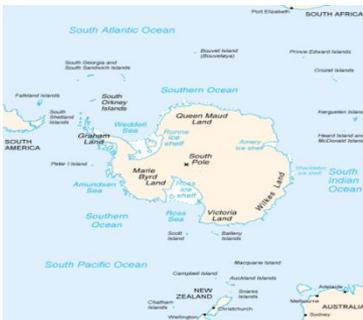
Determinazione e cicli biogeochimici di metalli in traccia

Campioni di interesse ambientale

Acque, suoli, sedimenti dell'Antartide
Particolato atmosferico Regione Piemonte
Particolato atmosferico Artide

Vegetali

Interazione tra metalli e vegetali
(assimilazione - effetti nocivi)
Biomonitoraggio
Tecniche di fitorisanamento



Metodologia: Sviluppo di metodi di analisi - Applicazione a campioni reali -
Trattamento chemiometrico - Interpretazione dei risultati

Strumentazione: Spettroscopia atomica - Voltammetria - HR-ICP-MS

Pre-requisiti: Conoscenza dei principi di funzionamento delle strumentazioni



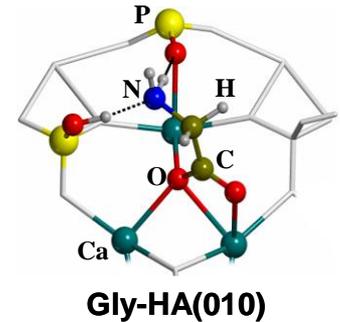
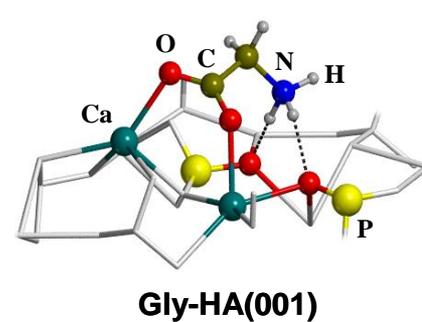
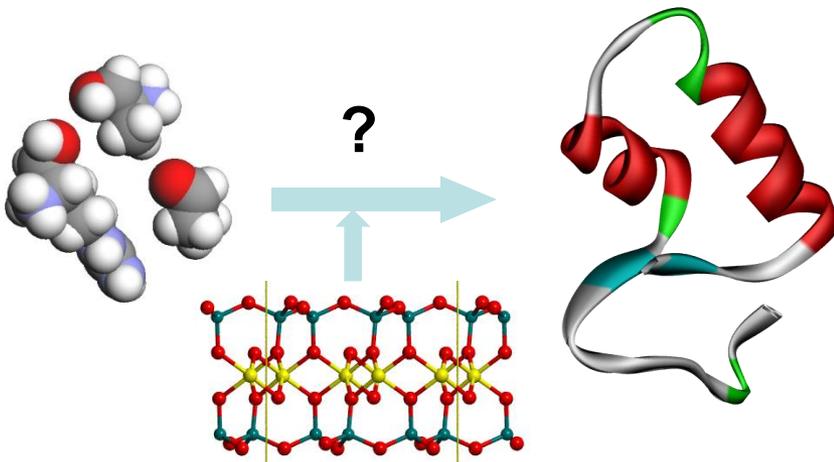
Ruolo chimico-fisico delle superfici inorganiche

Chimica prebiotica

*Sintesi proteica senza enzimi e cellule
Catalisi da parte di minerali feldspati*

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

Argomenti tesi laurea magistrale MCA: Gruppo di Chimica Teorica (Dovesi – Casassa – Civalleri – Ferrari)

Calcolo ab-initio delle proprietà di solidi e superfici

Messa a punto degli strumenti di calcolo

CRYSTAL06

(www.crystal.unito.it)

CRYSCOR

(www.cryscor.unito.it)

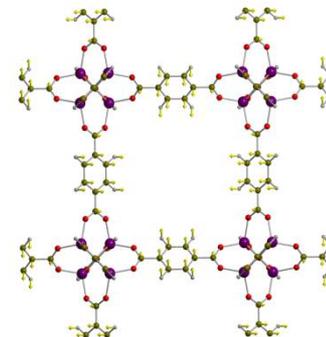
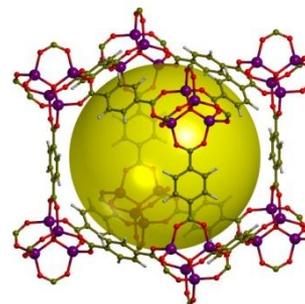
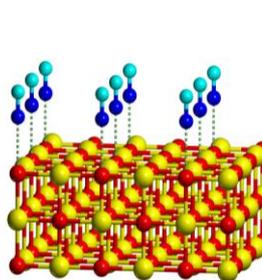
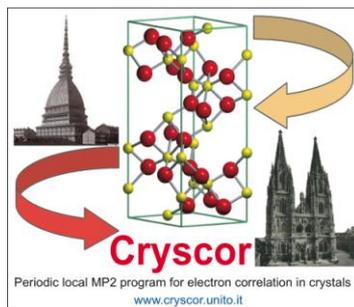
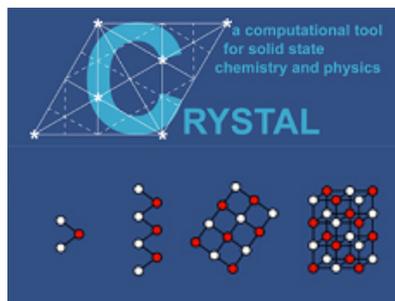
Proprietà elettroniche, strutturali, vibrazionali, dielettriche, magnetiche, elastiche, ... , e reattività

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

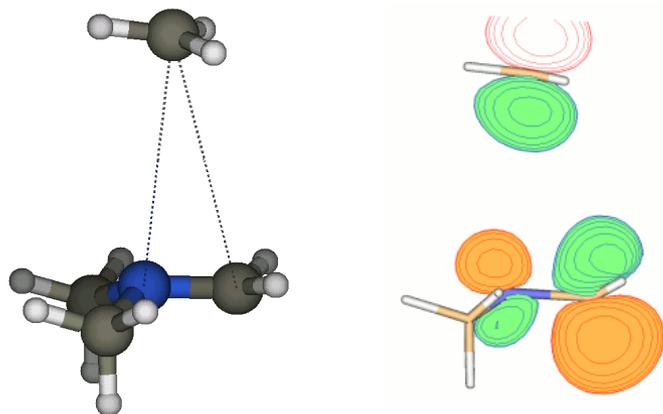




Studio teorico di meccanismi di reazioni organiche

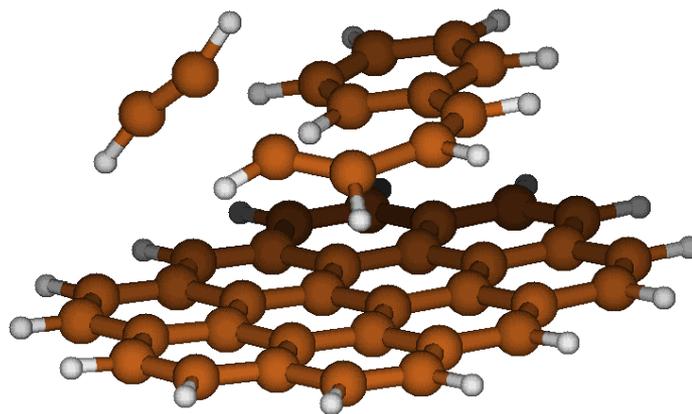
Meccanismi passanti per specie con struttura elettronica complessa

Caratterizzazione di strutture di transizione ed intermedi con carattere diradicalico; interazioni tra stati elettronici



Reazioni troposferiche e processi combustivi

Ossidazioni di sistemi organici, formazione e funzionalizzazione di PAH e particolato carbonioso



Metodologia: Studio dei cammini di reazione con metodi quantomeccanici ab initio multiconfigurazionali (CASSCF, CASPT2), Coupled Cluster, DFT. Programmi: Gaussian03, MolCas 7.

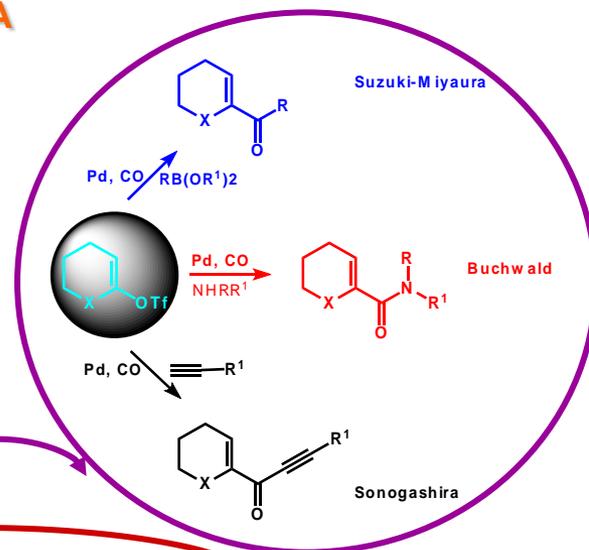
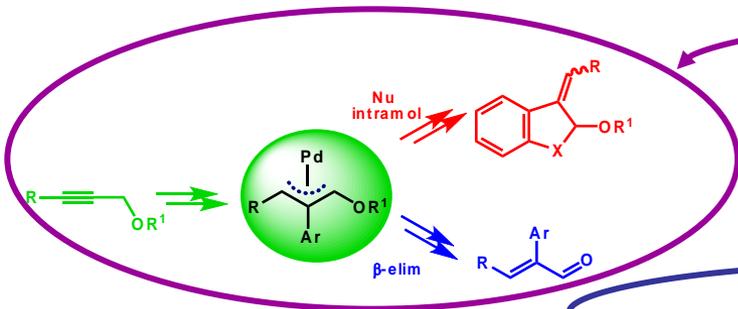
Strumentazione: Calcolatori.

Pre-requisiti: Chimica Fisica – Chimica Organica

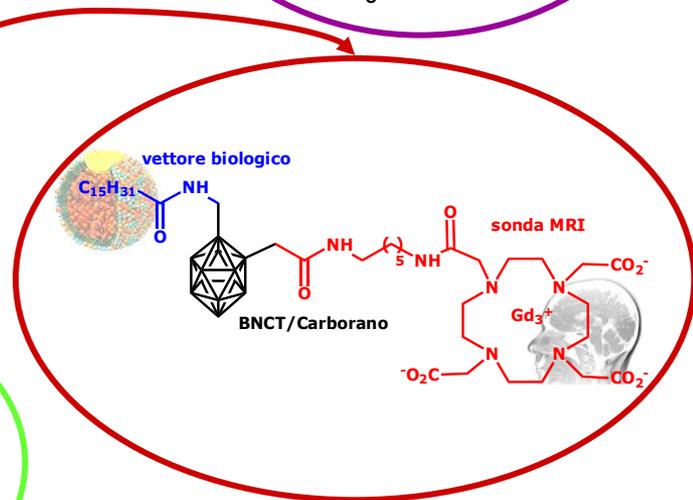
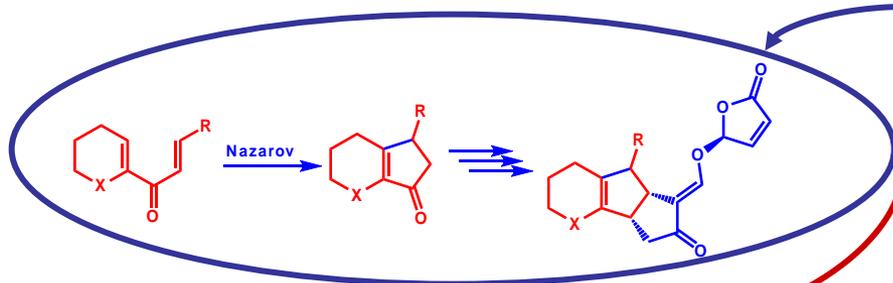


METODOLOGIE INNOVATIVE IN SINTESI ORGANICA

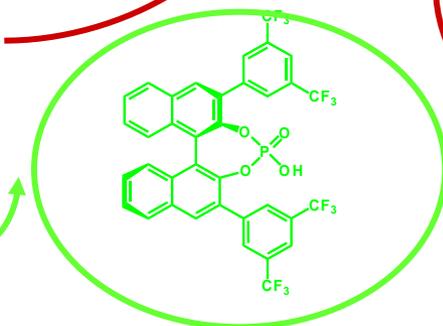
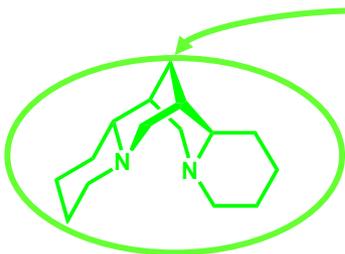
Sintesi mediate da reagenti e catalizzatori organometallici



Sintesi di sistemi eterociclici e di derivati biologicamente attivi



Funzionalizzazione di gabbie carboraniche



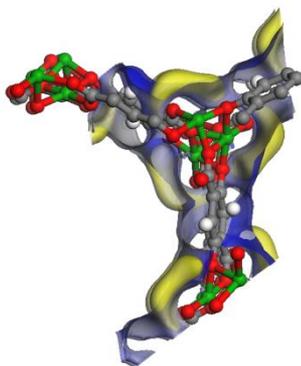
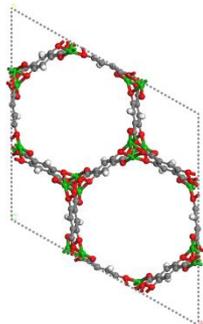
Sintesi libere da catalizzatori metallici: l'organocatalisi

METODOLOGIA: laboratorio di sintesi organica, reazioni in atmosfera inerte e a basse T, cromatografie; **STRUMENTAZIONE:** apparecchiature di Schlenk, ¹H e ¹³C NMR, GC e GC-MS, IR;
PRE-REQUISITI: corsi base di Chimica Organica, Spettroscopia e Caratterizzazione

Materiali ibridi organici inorganici

Coordination Polymers micro e/o meso- porosi

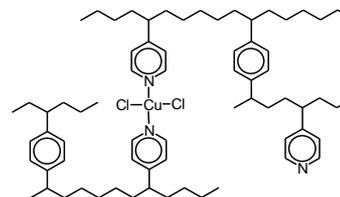
Studi recenti



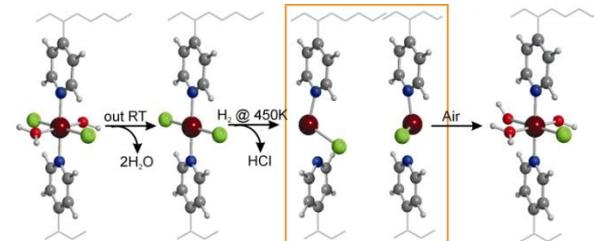
Mapa del potenziale elettrostatico che illustra i siti di adsorbimento preferenziali. (isosuperfici a -0.015 e $+0.015$ a.u. sono mostrate in giallo e blu rispettivamente)

Polimeri microporosi funzionalizzati

Studi recenti



PS-Py poly(4-vinylpyridine), 25% reticolato con DVB e funzionalizzato con ioni Cu(II)



Metodologia: Preparazione e caratterizzazione dei materiali, funzionalizzazione post sintesi, test delle proprietà (adsorbimento e/o catalisi)

Strumentazione: diffrazione raggi-x di polveri, spettroscopie, microscopie, test di adsorbimento e catalisi

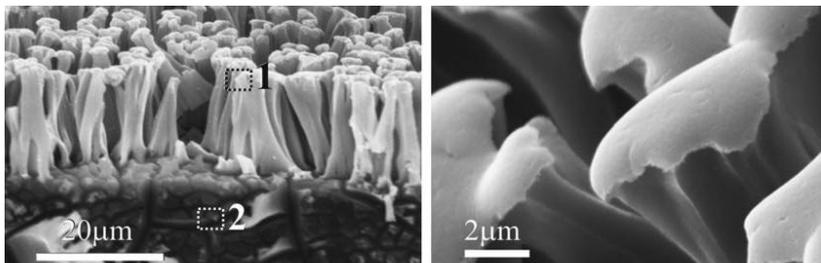
Pre-requisiti: nozioni base di: chimica organica, polimeri e dei composti organometallici, tecniche di caratterizzazione: diffrazione raggi-x di polveri, spettroscopie, microscopie, misure volumetriche

Argomenti tesi laurea magistrale MCA: Adriano Zecchina

Materiali nanostrutturati fotoattivi

Studi recenti

Immagini SEM di nanotubi di biossido di titanio



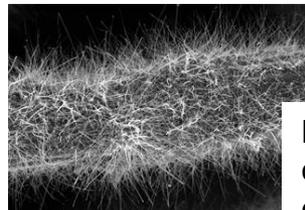
Metodologia: Preparazione e caratterizzazione dei materiali, test delle proprietà fotocatalitiche

Strumentazione: diffrazione raggi-x di polveri, spettroscopie, microscopie, test di adsorbimento e catalisi con fotoreattori

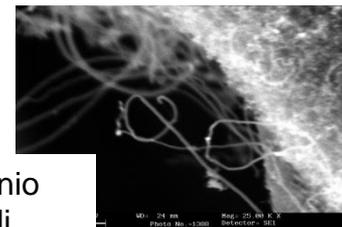
Pre-requisiti: nozioni base di: chimica inorganica, tecniche di caratterizzazione: diffrazione raggi-x di polveri, spettroscopie, microscopie, misure volumetriche, catalisi in fase liquida ed in fase gas

Materiali a base di carbonio

Studi recenti



Nanotubi di carbonio cresciuti su fibre di carbonio



Metodologia: Sintesi e caratterizzazione dei materiali, test delle proprietà di adsorbimento, conducibilità, resistenza meccanica

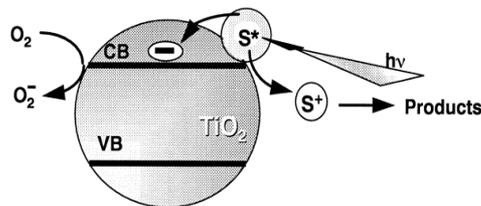
Strumentazione: Raman, microscopie HRTEM, e SEM, misure volumetriche

Pre-requisiti: nozioni base di: chimica inorganica, organica e dei polimeri tecniche di sintesi in fase gas; tecniche di caratterizzazione: Raman, microscopie elettroniche, misure volumetriche,

Aspetti analitici ed applicazioni ambientali dei sistemi dispersi

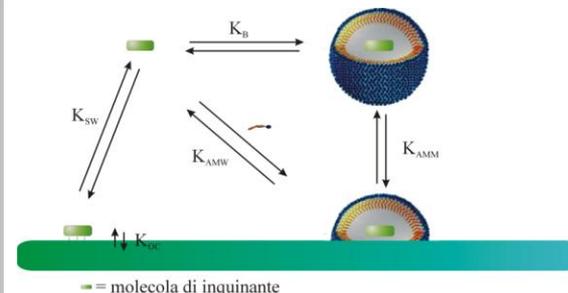
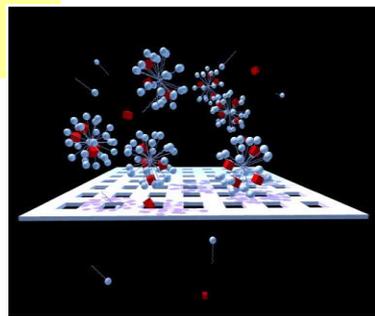
Trattamenti di ossidazione avanzata in presenza di ossidi semiconduttori

-Degradazione di inquinanti organici (pesticidi, coloranti, residui di sintesi, ecc...) presenti in reflui acquosi: ottimizzazione dei parametri sperimentali e controllo analitico del processo



Solubilizzazione, preconcentrazione ed estrazione di inquinanti organici e/o inorganici mediante aggregati micellari

-Trattamento di reflui liquidi e bonifica di fasi solide
- Sviluppo di protocolli analitici "solvent-free"



Strumentazione: HPLC-DAD-MS; GC-MS; cromatografo ionico; spettrofotometro UV-Vis; analizzatore di tossicità; dispositivi per irraggiamento luminoso

Pre-requisiti: Chimica colloidale e dei tensioattivi