

## LE ATTIVITÀ DELLA SCI NELL'ANNO INTERNAZIONALE DELLA CHIMICA

*Quest'anno si sono svolte moltissime attività per celebrare questa ricorrenza. In particolare il Congresso Nazionale tenutosi a Lecce lo scorso settembre ha visto il contributo di tutte le divisioni della SCI. In queste pagine viene riportata la sintesi di quelle svolte da alcune di esse.*

### DIVISIONE DI ELETTROCHIMICA

*Aldo Magistris, Luigi Falciola*

Anche quest'anno gli elettrochimici italiani hanno avuto la possibilità di incontrarsi e confrontarsi nelle Giornate dell'Elettrochimica Italiana (GEI 2011), che, in occasione dell'Anno Internazionale della Chimica, si sono svolte insieme alle altre Divisioni della Società Chimica Italiana nell'ambito del XXIV Congresso Nazionale, che si è tenuto a Lecce lo scorso settembre. Un momento speciale è stata la consegna, in Sessione Plenaria, della prestigiosa Medaglia Galvani 2011 al professor Akira Fujishima, Professore Emerito della Tokyo University of Science e Chairman della Kanagawa Academy of Science and Technology. Il premio è stato assegnato dal Direttivo della Divisione in riconoscimento del grande contributo scientifico che il professor Fujishima ha apportato nel campo della fotocatalisi e della fotoelettrochimica. Il professor Fujishima è riconosciuto a livello Internazionale come il "Padre della Fotocatalisi", in particolare per lo studio delle proprietà fotocatalitiche e superidrofiliiche del biossido di titanio. Tale studio è iniziato nel 1972 con la decomposizione fotocatalitica dell'acqua ottenuta per via elettrochimica nel processo che avviene alla superficie del  $\text{TiO}_2$ , chiamato effetto Honda-Fujishima. La scoperta delle proprietà autopulenti del  $\text{TiO}_2$ , fatta dal suo

gruppo di ricerca sotto la sua supervisione, ha portato una grande rivoluzione nelle industrie della ceramica e del vetro. Il professor Fujishima ha ricevuto numerosi premi prestigiosi, tra cui l'Asahi Prize (1983), l'Inoue Harushige Award (1998), il Chemical Society of Japan Award (2000), l'Heinz Gerischer Award of the Electrochemical Society (2003) e il Japan Prize (2004).

I lavori della Divisione si sono articolati in diversi mini-simposi in cui sono state presentate 39 comunicazioni orali e 16 comunicazioni poster. Ogni simposio è stato aperto da una key-note lecture, su tematiche di grande impatto ed attualità.

Bruno Scrosati ha contribuito sul tema "Lithium batteries: a look into the future", soffermandosi sull'im-



Anira Fujishima

portanza della morfologia degli elettrodi e sulla possibilità di ottenere notevoli progressi in termini di densità di energia, ad esempio con le “superbatterie” litio-zolfo e litio-aria.

Antonino Aricò con la key-note “Advanced electro-catalysts for intermediate temperature PEM fuel cells”, ha aperto il tema delle celle a combustibile, soffermandosi sulle proprietà elettrocatalitiche delle leghe di platino.

Con la key-note “Dissociative electron transfer to organic halides: from theory to applications”, Armando Gennaro ha introdotto il tema dell'elettrochimica molecolare discutendo, sia dal punto di vista teorico sia sperimentale, sui meccanismi di riduzione catalitica di alogenuri organici. Sul tema dell'ambiente, Achille De Battisti, con la key-note “Electrochemistry in waste water and soil remediation”, si è soffermato sull'utilizzo dei metodi elettrochimici per la decontaminazione dei suoli.

Inoltre, grazie al forte carattere interdisciplinare dell'elettrochimica, gli elettrochimici hanno avuto l'occasione per un intenso confronto con i soci di altre due Divisioni nell'ambito di sessioni congiunte, ed in particolare con la Divisione di Chimica Analitica, in una sessione dedicata ai Sensori Elettrochimici, aperta dalla key-note lecture del professor Kulesza (Functionalized carbon nanostructures and metal nanoparticles: from effective charge propagation to enhancement of electrocatalytic, photoelectrocatalytic and bioelectrocatalytic properties) e con la Divisione di Chimica Fisica, aperta dall'intervento key-note del professor Paolucci (Carbon Molecular Nanosystems Investigated by Electrochemical Tools).

Un altro appuntamento importante, ormai classico per la nostra Divisione, è stata la consegna dei 3 Premi di Laurea e dei 3 Premi di Dottorato, a giovani ricercatori elettrochimici. Hanno partecipato al bando di concorso 18 Dottori e 16 Dottori di Ricerca. Le tesi sono state valutate dal Direttivo della Divisione, che ha molto apprezzato l'alto livello scientifico di tutti i lavori presentati. I premi assegnati sono stati sponsorizzati, come ormai di consuetudine, da alcune fondazioni e aziende elettrochimiche. I vincitori, che hanno potuto presentare il loro lavoro in una sessione speciale a loro dedicata, sono: Stefania Ferrari (Uni-



versità degli Studi di Pavia - Premio di Dottorato Fiamm: Synthesis and characterization of materials for electrochemistry), Mauro Pasta (Università degli Studi di Milano e Milano Bicocca, Stanford University - I Premio di Dottorato Fondazione De Nora: Glucose electrooxidation), Stefania Siracusano (ITAE-CNR di Messina - Il Premio di Dottorato Fondazione De Nora: Development and characterization of catalysts for electrolytic hydrogen production and chlor-alkali electrolysis cells), Daniele Perego (Politecnico di Milano - Premio di Laurea Shap: Electrodeposition of Metal-Oxide-Metal nanowire heterostructures for ReRAM applications), Davide Rosetolato (Università di Ferrara - Premio di Laurea Photoanalytical: The PVD approach for the preparation of Ir-Sn dioxide thin films), Alice Soldà (Università degli Studi di Padova - Premio di Laurea Metrohm: Electrochemical immunosensors and peptide self-assembled monolayers for cancer biomarker protein detection). I lavori della Divisione si sono conclusi con l'assemblea divisionale in cui i soci hanno potuto discutere ed approvare le iniziative ed i progetti per il prossimo anno, dandosi appuntamento alle prossime GEI 2012.

## DIVISIONE DI CHIMICA INDUSTRIALE

*Martino Di Serio, Mario Marchionna*

Il programma delle sessioni parallele del XXIV Convegno Nazionale SCI della Divisione di Chimica Industriale è stato caratterizzato dalla stretta collaborazione con il Gruppo Interdivisionale di Catalisi. Inoltre insieme alla Divisione di Chimica Organica è stato organizzato il minisimposio “Catalisi supramolecolare”. Tale programma è stato incentrato sulle seguenti tematiche, che costituiscono i temi centrali di interesse della moderna chimica industriale (si veda anche la Special Section relativa nel numero di *Science* del 7 agosto 2009):

- Chimica Industriale e Sviluppo Sostenibile (nuovi processi, conver-

sione di biomasse a prodotti chimici, green chemistry...);

- Polimerizzazione e Nuovi Materiali Polimerici;
- Nuovi Processi per la Chimica fine e Secondaria;
- Energia e Ambiente (conversione di biomasse, CO<sub>2</sub> chemistry & handling, trattamento rifiuti...);
- Nuovi Processi Catalitici;
- Modelling e Reaction Engineering;
- Scienza e Processi di Separazione;
- Aspetti di Sicurezza.



Nelle sessioni parallele si sono avute 5 key notes, 35 comunicazioni orali e 24 comunicazioni poster. Nella calda aula della ex-Sperimentale Tabacchi, dove si è tenuto gran parte del programma della sessione, hanno assistito alle diverse sessioni una sessantina di congressisti più diversi delegati delle altre Divisioni accorsi ad assistere presentazioni anche di loro interesse.

La prima keynote dal titolo “New trends in biodiesel production” è

stata del prof. Elio Santacesaria dell’Università di Napoli “Federico II”, cui il giorno precedente, nella cerimonia di apertura del convegno, era stata assegnata la medaglia della SCI dedicata a Emanuele Paternò. Nella sua relazione il prof. Santacesaria ha indicato gli argomenti su cui attualmente è rivolta la ricerca sulla produzione di biodiesel sia per gli aspetti catalitici che quelli reattoristici, mettendo in evidenza le ampie possibilità di intensificazione del processo.

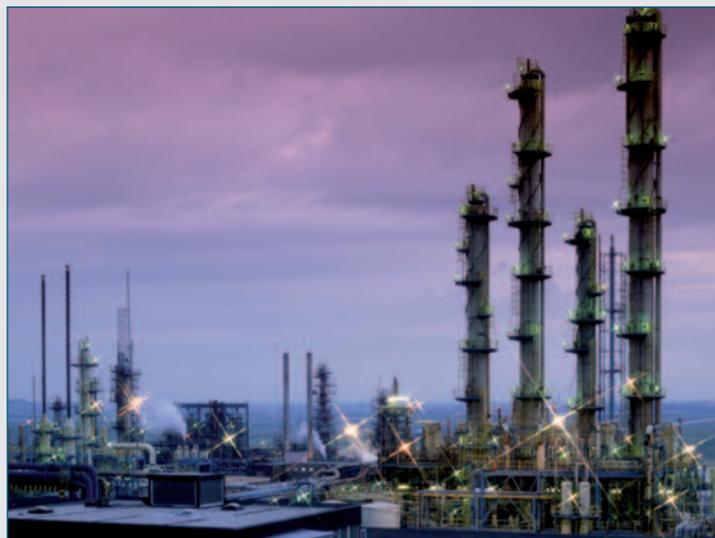
La seconda keynote è stata tenuta dal dr. Carlo Perego, direttore dell’Istituto Donegani di Novara di Eni, dopo l’assegnazione della medaglia Levi da parte del dr. Mario Marchionna, presidente della divisione. La Medaglia Levi è una medaglia della Divisione di Chimica Industriale, istituita per onorare la memoria del prof. Mario Giacomo Levi, da assegnare periodicamente ad uno studioso che si sia distinto per l’attività svolta nel campo della Chimica Industriale. Nella propria keynote “The role of catalysis in the heavy oil up-grading: past and present”, il dr. Perego, dopo aver presentato i principali aspetti catalitici dell’up-grading degli heavy oil, ha descritto l’Eni Slurry Technology (EST) che entrerà in marcia nella Raffineria di Sannazzaro con una potenzialità di 23.000 BPSD. Inoltre Perego ha mostrato anche come il problema dell’upgrading di petroli pesanti non sia una novità in assoluto, anzi di come fosse stato già stato affrontato in Italia dalla Montecatini e dall’ANIC che, grazie al lavoro dello stesso Mario Giacomo Levi, di Giacomo Fauser, Guido Donegani e Giuseppe Pastonesi, nel 1938 realizzarono nella raffineria di Bari un processo di idrogenazione catalitica per l’upgrading del petrolio albanese.

Invitato dal Gruppo Interdivisionale di Catalisi (GIC), il prof. Mats Larhed dell’Università di Uppsala nella terza keynote “Efficient Palladium(II) - Catalysis. Oxidative Heck Coupling and Addition Reactions” ha presentato i risultati del lavoro del proprio gruppo nello sviluppo di nuove reazioni di coupling catalizzate da palladio(II). In particolare, ha presentato i risultati sulla prima reazione di Heck condotta in condizioni “open-vessel” e a temperatura ambiente dove l’ossigeno dell’aria è utilizzato come riossidante del palladio. Inoltre sono state descritte la sintesi di derivati dello stirene ottenuti per coupling di arilborani con vinilacetato e nuovi metodi di sintesi di aril chetoni da acidi benzoici o acidi aril sulfonici e nitrili via decarbossilazioni/desolfonazioni degli acidi aromatici

catalizzate da palladio(II). Sempre invitato dal GIC, il prof. Gabriele Centi dell’Università di Messina ha tenuto la quarta keynote “Catalysis for sustainable chemistry: looking at the future” dove ha affrontato diversi aspetti degli sviluppi possibili della catalisi e dell’industria chimica. In particolare ha messo in evidenza come lo sviluppo di catalizzatori nanofibrosi da utilizzare nei microreattori fino ad arrivare ai nanoreattori (canali di nanomembrane catalitiche) possa portare notevoli vantaggi nell’intensificazione di processo. Inoltre ha sottolineato l’importanza della catalisi in due settori fondamentali per lo sviluppo sostenibile: la conversione delle biomasse e l’utilizzo dell’energia solare.

Il minisimposio sulla “Catalisi Supramolecolare” ha visto contributi di notevole qualità, in primis la conferenza “Shaping the Beating Heart of Artificial Photosynthesis: Oxygenic Nano-Hybrid Interfaces” della prof.ssa Marcella Bonchio dell’Università di Padova, che ha messo in luce alcuni aspetti fondamentali della reazione di splitting fotocatalitico dell’acqua, che consente naturalmente di convertire luce solare in energia chimica. In quella sede è stato assegnato dalla Divisione di Chimica Organica alla prof. Bonchio il Premio alla Ricerca: Chimica Organica nei suoi aspetti di determinazione strutturale e interazioni molecolari. Sempre nell’ambito dello stesso simposio è da segnalare l’altra invited lecture, tenuta dal Prof. Joost Reek dell’Università di Amsterdam, su “Supramolecular ligands in transition metal catalysis, evolutionary ligand screening and a first approach to catalyst selection” e incentrata sulle relazioni fra chimica supramolecolare e il disegno di più efficaci catalizzatori a base di metalli di transizione.

L’ultima keynote “Plastic zeolites” è stata del prof. Gaetano Guerra che ha descritto le proprietà di materiali termoplastici in grado di ospitare nella loro struttura cristallina molecole di piccole dimensioni. In particolare, ha mostrato come rimuovendo queste molecole ospite si ottengono strutture cristalline nanoporose. Ha poi mostrato come la fase cristallina influenza la tipologia di porosità: la fase  $\delta$  del polistirene sindiotattico dà luogo a cavità nanoporose mentre la fase  $\epsilon$  forma nanocanali. La keynote si è conclusa presentando possibili applicazioni industriali di questi materiali. Durante il convegno è stato assegnato



anche il premio del Gruppo Interdivisionale di Catalisi per la migliore tesi di dottorato, dedicato alla memoria del compianto prof. Adolfo Parmaliana alla dr.ssa Stefania Guidetti dell'Università di Bologna, che ha presentato una memoria dal titolo "Catalytic liquid- and gas-phase oxidations for the synthesis of intermediates and specialty chemicals: some examples of industrial relevance". In particolare la dr.ssa Guidetti ha presentato i suoi risultati ottenuti nella sintesi del menadione per ossidazione del 2-metil-1-naftalene con acqua ossigenata, nello studio dell'ossidazione del benzene con acqua ossigenata e nella valorizzazione della glicerina per ossidazione ad acido acrilico.

In generale, tutte le comunicazioni orali e poster hanno mostrato l'elevata qualità scientifica della ricerca italiana nel settore della chimica industriale e della catalisi; in particolare, si deve evidenziare che negli ultimi due giorni di convegno sono state presentate 20 comunicazioni orali dai vincitori delle borse di studio bandite dalla Divisione di Chimica Industriale e dal Gruppo Interdivisionale di Catalisi per la partecipazione al convegno di giovani non strutturati. Anche la sessione poster è stata seguita con particolare interesse.

Nella prima giornata si è anche affrontato il tema delle attività di alcune società prototipali (start-up), che stanno iniziando il cammino dell'industrializzazione di ricerche provenienti da ambienti universitari o dal CNR: in questo ambito è stata presentata l'attività di Daunia Solar Cell su "Emerging Materials for Dye Sensitized Solar Cells", in collaborazione con Tozzi Engineering. È stato mostrato come l'attività di ricerca svolta presso enti di ricerca pubblici, nel caso specifico il Centro di

Ricerca CNR-INFMM-NLL di Lecce, ha consentito di acquisire le conoscenze necessarie per una successiva prototipazione di celle solari foto-voltaiche foto-elettrochimiche di terza generazione, che avviene adesso nei laboratori di Daunia Solar Cell per una futura industrializzazione.

Le attività di società derivanti da spin-off universitari sono considerate argomento di particolare interesse della Divisione e il tema sarà specificatamente trattato nel Congresso Divisionale del prossimo anno.

In conclusione, la sessione divisionale ha fornito un'interessante rassegna sulle evoluzioni più recenti nel campo della chimica industriale e della catalisi, ponendo particolare attenzione sia agli aspetti di ricerca fondamentale, sia a quelli più prettamente applicativi cercando di coprire il più possibile lo spettro delle diverse realtà industriali interessate e di fornire un'immagine a tutto tondo della versatilità dei processi catalitici. D'altra parte, la stella polare di questa Divisione deve proprio essere la capacità di compendiare aspetti della ricerca di base, di qualunque genere essi siano e di certo non solo di natura strettamente chimica, con la continua tensione al loro sviluppo mediante passaggi di scala verso l'ottenimento di applicazioni industriali (si veda anche l'editoriale del Prof. S. Carrà (*Chimica e Industria*, 2011, **93**(5), 1). Le sfide del mondo odierno chiedono una comprensione ancora più interdisciplinare degli aspetti di base, ma risulta fondamentale allo stesso tempo la capacità di immaginare i mercati di applicazione, consolidati ma anche nuovi o solo emergenti, e di intraprendere un rapido ed incisivo cammino per lo sviluppo applicativo degli stessi.

## DIVISIONE DI CHIMICA INORGANICA

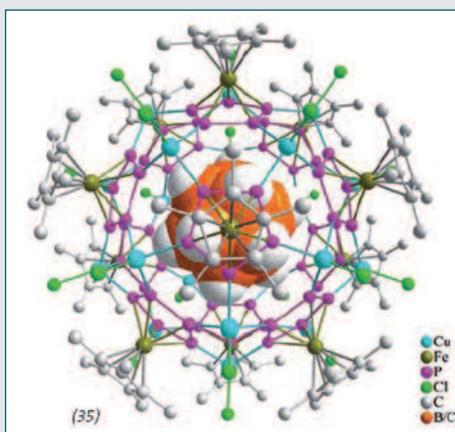
*Adriana Saccone, Maurizio Peruzzini*

Quest'anno il Convegno nazionale della Divisione di Chimica Inorganica si è svolto a Lecce nell'ambito del Congresso nazionale della SCI che ha celebrato nella splendida città pugliese, ricca dei più preziosi tesori del barocco del nostro Paese, l'Anno Internazionale della Chimica. Il nostro Convegno è ritornato quindi in questa occasione, a soli tre anni di distanza, nel Salento, ancora una volta organizzato in modo sempre efficace e con grande successo di partecipazione, dal socio e collega Francesco Paolo Fanizzi e dal suo encomiabile gruppo di giovani. A loro tutti va un sentito e riconoscente ringraziamento da parte di tutti soci della Divisione.

Come ormai da molti anni è prassi costante nei nostri Convegni, i partecipanti sono stati numerosi, oltre 150, un numero quindi ancora maggiore di quello già cospicuo registrato tre anni orsono, ed i contributi presentati sono stati di alto valore scientifico, testimoniando la vitalità

della comunità chimica inorganica italiana e la poliedricità degli interessi che si riconoscono nella disciplina. Le comunicazioni orali sono state infatti ben rappresentative delle varie macroaree della chimica inorganica, evidenziando appunto multidisciplinarietà e ricchezza di contenuti. Argomenti solo apparentemente distanti, che si riconoscono

nella chimica bioinorganica, in quella dei materiali e dello stato solido, nella catalisi omogenea ed eterogenea, nella chimica metallorganica e di coordinazione, nella chimica degli elementi dei gruppi principali ed altri ancora, si sono susseguiti nelle varie sessioni scientifiche. L'elevato numero di richieste di comunicazioni orali rispetto al massimo numero possibile di slot orali (32), dovuto alla contrazione del programma che ha fatto necessariamente seguito all'inserimento del nostro congresso divisionale all'interno del più ampio congresso nazionale SCI, ha costretto il Comitato Scientifico ad ope-



rare delle scelte che hanno voluto privilegiare la rappresentatività delle sedi e delle tematiche di ricerca piuttosto che la validità scientifica dei contributi, tutti, indipendentemente dall'essere stati o meno selezionati per il programma orale, di grande valore scientifico.

Numerose (circa 80) sono state anche le comunicazioni poster, che sono state ripartite in quattro sessioni, permettendo così una migliore e più rilassata fruizione delle comunicazioni scientifiche selezionate come poster. Molte di queste sono state presentate da giovani chimici inorganici che con il loro entusiasmo hanno portato ai lavori congressuali una ventata di freschezza ed ottimismo per il futuro. Dodici tra questi giovani, provenienti da altrettante sedi geograficamente distinte, hanno potuto usufruire di un supporto economico da parte della Divisione di Chimica Inorganica che ha sostenuto la quota di iscrizione al congresso. Da sempre la Divisione di Chimica Inorganica si è spesa per favorire la partecipazione dei giovani chimici inorganici alle proprie manifestazioni scientifiche, Scuole o Congressi che fossero, conferendo borse per la partecipazione all'evento. Anche questo anno l'impegno è stato sensibile a fronte di una situazione economica della Divisione non certo rosea che ha causato non poche difficoltà a mantenere questo livello di impegno nell'erogazione delle borse ai giovani ricercatori.

Il convegno si è aperto con la giornata dedicata alla bioinorganica che ha ospitato la plenary lecture tenuta da Giovanni Natile dell'Università di Bari che ha, con la precisione e la completezza che gli sono solite, discusso dei meccanismi di azione e trasporto a livello cellulare dei farmaci antitumorali a base di platino. Allo stesso modo, nelle altre giornate del convegno, i lavori sono stati sempre aperti da comunicazioni plenarie tenute da ricercatori di grande rilevanza internazionale. Spiccano quindi, perché rimaste incise nella memoria dei partecipanti, le belle ed ampie plenary lectures tenute dai nostri ospiti stranieri: il francese Bruno Chaudret, ricercatore a capo del recente, ma già prestigioso, Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets del CNRS di Tolosa che ha presentato la relazione "Organometallic nanoparticles: growth and surface chemistry", e lo svizzero Hansjörg Grützmacher del Laboratorium für Anorganische Chemie, ETH, di Zurigo che ha brillantemente illustrato aspetti fondamentali ed applicati legati alla chimica dei composti a basso numero di coordinazione del fosforo illustrandone "...fictions, facts, and applications". Ad essi si è aggiunto, a completare una triade di livello scientifico assolutamente elevato, lo statunitense Michael Hall della Texas A&M University che ha discusso criticamente delle applicazioni dei metodi DFT allo studio dei meccanismi di reazione nei processi che coinvolgono ioni complessi dei metalli di transizione.

La chimica inorganica italiana deve molto del suo successo all'attività di aggregazione ed identificazione culturale portata avanti dai Consorzi Interuniversitari di riferimento e dai gruppi interdivisionali della SCI che più si riconoscono nelle specifiche scientifiche della Divisione.

È parso quindi giusto al comitato organizzatore destinare quattro keynote lectures ad altrettanti rappresentanti dei Consorzi Interuniversitari in cui si riconoscono molti degli interessi scientifici della chimica inor-

ganica. Il salentino Michele Benedetti per il CIRCMSB, Consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli nei Sistemi Biologici, ha parlato di "Cell uptake and trafficking of metalated purines: a new possible path to antitumor and antiviral drugs", mentre Stefano Ciurli dell'Università di Bologna, e rappresentante del CIRMMP, Consorzio Interuniversitario Risonanze Magnetiche su Metalloproteine Paramagnetiche, ha illustrato il ruolo dello ione  $Ni^{2+}$  nell'enzima ureasi precisandone aspetti legati al "...sensing, trafficking and catalysis". Ad essi si sono aggiunti il fiorentino Matteo Mannini per il Consorzio INSTM, Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, che ha tenuto la relazione "A multidisciplinary research approach under the aegis of the INSTM consortium, exploration of the properties of nanostructured magnetic molecules", ed il salernitano Alfonso Grassi che a nome del CIRCC, Consorzio Interuniversitario Reattività Chimica e Catalisi, ha discusso della scienza della catalisi come motore per lo sviluppo di una chimica sostenibile. I quattro relatori sopra ricordati hanno brillantemente ottemperato al compito richiesto illustrando le più recenti ricerche scientifiche che caratterizzano il vivace mondo dei consorzi della chimica inorganica.

Per i gruppi interdivisionali hanno tenuto interessanti conferenze ad invito Carlo Mealli del CNR fiorentino e Coordinatore del GICS, Gruppo Interdivisionale di Chimica Strutturale, che ha presentato una keynote lecture dal titolo "Correlations between structures and chemical behaviours" e Marino Basato dell'Università di Padova ed attuale Presidente del GICO, gruppo interdivisionale di Chimica Organometallica. Per tale gruppo interdivisionale, il principale per dimensioni dell'intera SCI, è stata organizzata una sessione comune con la Divisione di Chimica Organica, l'altra delle due anime del gruppo interdivisionale. All'interno di questa sessione bicefala gestita dal GICO sono state presentate quattro ulteriori keynotes, due da parte di relatori soci della Divisione di Chimica Inorganica, Marino Basato, appunto, che ha discusso sul tema dei carbeni coordinati ad un metallo di transizione ("Metal-coordinated carbenes: reactive species or robust ligands?"), e la milanese Emma Gallo che ha parlato di amminazione di idrocarburi catalizzata da porfirine di rutenio.

A controparte dell'impegno dei nostri relatori nella sessione comune si sono cimentati nella stessa due chimici organometallici di matrice, per così dire, organica, quali il bolognese Marco Bandini che ha brillantemente mostrato il massiccio e crescente impiego di composti di oro per la sintesi catalitica di prodotti organici per la chimica fine e del barese Antonio Monopoli che ha illustrato l'uso di nanoparticelle metalliche come catalizzatori per la green chemistry". Momenti particolarmente significativi dei lavori divisionali si sono avuti in occasione del conferimento dei premi e riconoscimenti che arricchiscono anno dopo anno il patrimonio della Divisione e che hanno ormai una storia consolidata nella tradizione della Divisione e della Chimica italiana tout court. Si tratta del Premio intitolato a Paolo Chini, di quello che porta il nome di Raffaello Nasini e, ultimo, ma altrettanto importante, il Premio Miglior Tesi di Dottorato.

La Chini Lecture viene assegnata alternativamente dalla Divisione di

Chimica Inorganica e dalla Divisione di Chimica Industriale a scienziati, italiani o stranieri, che si siano distinti nell'ambito della catalisi omogenea ed eterogenea e della chimica organometallica. Quest'anno è stato compito della Divisione di Chimica Inorganica assegnare il premio che è stato conferito a Claudio Bianchini dell'ICCOM-CNR di Firenze, uno degli scienziati italiani di riferimento della chimica metalorganica e della catalisi omogenea ed eterogenea. Il premio a Bianchini intende essere un premio ad un brillante ricercatore che ha nella sua lunga e importante carriera scientifica attraversato molti, se non tutti, i settori propri della chimica organometallica e della catalisi omogenea ed eterogenea riuscendo infine, nell'ultimo decennio, a coniugare il mondo dei composti organometallici con quello delle energie rinnovabili e delle fuel cells per la produzione di corrente elettrica. Temi, questi ultimi, che sono stati al centro della sua lezione plenaria intitolata "Molecular and nanosized catalysts for the conversion of renewables into energy and chemicals".

Il Premio Nasini, dedicato invece a giovani ricercatori di età inferiore a 40 anni che hanno contribuito significativamente all'ampliamento delle conoscenze nell'ambito della Chimica Inorganica, è stato conferito a Lecce alla giovane e brava Cristiana Di Valentin dell'Università di Milano Bicocca, rappresentante di primo piano della Scuola di Chimica teorica milanese, disciplina di stretto interesse per la chimica inorganica (Figura). La motivazione che ha condotto a premiare la giovane ricercatrice milanese è quella di aver contribuito in modo originale e significativo all'analisi delle proprietà fotocatalitiche della titania, evidenziando il ruolo dei difetti intrinseci ed estrinseci con tecniche computazionali di avanguardia. La premiata ha tenuto una notevole relazione plenaria su tale argomento proponendo la lecture "Photo-activation of  $TiO_2$ : insights from theory".

Infine è stato conferito Il Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica a Marina Faiella, una giovane ricercatrice napoletana che ha discusso recentemente con Vincenzo Pavone la tesi che ha ispirato la comunicazione "Metalloprotein models: developing catalytic systems" presentata a Lecce. Durante l'assemblea annuale dei soci è ormai tradizione consolidata della nostra Divisione premiare con una targa al merito un socio che abbia svolto un'attività meritoria al servi-



Cristiana Di Valentin riceve la Medaglia Raffaello Nasini 2011 da Roberto Gobetto (vicepresidente della Divisione, al centro) e da Maurizio Peruzzini (Presidente della Divisione di Chimica Inorganica, a destra)

zio della comunità dei chimici inorganici con lo scopo di mantenerla coesa e farne crescere consapevolezza e forza.

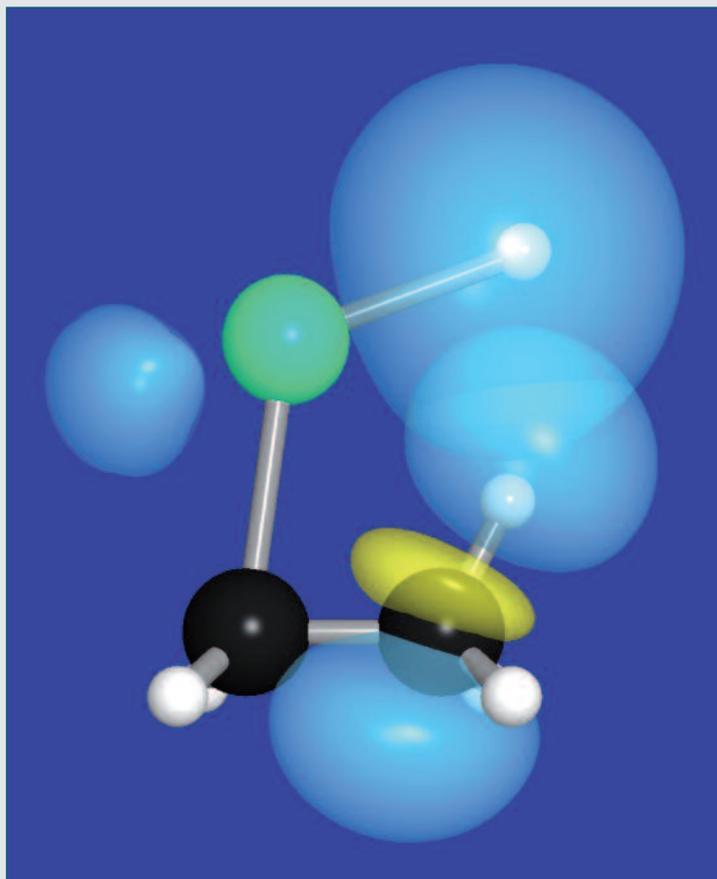
Quest'anno la targa è stata assegnata a Luigi Busetto dell'Università di Bologna e ex-prorettore dell'Alma Mater in riconoscimento della sua dedizione all'attività della Divisione e del suo continuo e disinteressato impegno a favore della comunità dei Chimici Inorganici Italiani. Il convegno si è chiuso con un bilancio globale molto positivo che ha permesso di rafforzare relazioni preesistenti sia scientifiche che personali e di crearne di nuove e si è congedato dal bellissimo Salento leccese dandosi appuntamento al XL Convegno nazionale della Divisione che si terrà sul mare della ugualmente bella Riviera Ligure di Levante ospitato dalla incantevole cittadina di Sestri Levante, non lontano da Genova, dal 9 al 13 settembre 2012. All'organizzazione del congresso ligure, affidata al gruppo genovese dei chimici inorganici, va l'augurio di poter mettere in cantiere un Congresso Divisionale che continui a dare testimonianza dell'elevata qualità scientifica della Chimica Inorganica italiana e che sappia, come è successo a Lecce, costruire un'atmosfera di collaborazione e curiosità scientifica.

## CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE

*Gianfranco Pacchioni*

Le discipline teoriche e computazionali applicate alle scienze molecolari hanno acquisito negli ultimi anni una rilevanza fondamentale: il chimico moderno (e lo scienziato dei materiali, il biochimico, il chimico ambientale) non possono oggi prescindere dalla modellazione e dall'interpretazione teorica. Semplicemente, gli oggetti della ricerca chimica contemporanea sono così complessi da richiedere l'analisi teorica per una loro piena comprensione, sfruttando i concetti base della

meccanica quantistica e della termodinamica statistica. Negli anni, i chimici teorici e computazionali si sono dotati di strumenti originali, e la comunità CTC italiana ha potuto fornire un rilevante contributo, riconosciuto a livello nazionale ed internazionale. La creazione della Divisione ha permesso di iniziare un percorso di dialogo tra tutti i chimici teorici e computazionali, che arricchisce la Società Chimica Italiana e consente una migliore diffusione della cultura chimica teorica e model-



listica nel nostro Paese. Per questi motivi, il Consiglio Direttivo della Divisione, presieduto da G. Pacchioni (U. Milano Bicocca) e composto da A. Polimeno (vicepresidente, U. Padova), O. Crescenzi (U. "Federico II"), D. Duca (U. Palermo), L. Marinelli (U. "Federico II"), F. Santoro (IPCF - CNR), M. Stener (U. Trieste), M. Casarin (U. Padova) ha inteso la programmazione delle sessioni dedicate alla CTC come un'occasione di presentare alla comunità dei chimici italiani l'insieme variegato e complesso di metodi, applicazioni e tecnologie che è sottinteso dalla semplice dizione 'chimica computazionale'.

Nella prima sessione ("Metodi") sono state presentati contributi dedicati ad aspetti metodologici e di sviluppo di algoritmi: R. Dovesi (U. Torino) ha rivisitato le recenti estensioni dei metodi quantistici per i sistemi cristallini ai nanotubi, N. Rega (U. "Federico II") ha presentato recenti applicazioni di ab initio molecular dynamics di molecole in soluzione. Nella seconda sessione ("Materiali ed energia"), G. Pacchioni ha discusso le applicazioni dei metodi quantistici all'interpretazione delle proprietà di ossidi metallici, mentre nella terza sessione ("Soft matter e biosistemi"), R. Improta (CNR) e G. Suffritti hanno presentato rispettivamente nuovi risultati sugli stati eccitati dei polinucleotidi e simulazioni di acqua superraffreddata in geometrie nanoconfinata.

La natura interdisciplinare e pervasiva della CTC è stata dimostrata nel corso delle sessioni congiunte: nel corso della sessione congiunta con la Divisione di Chimica Organica, C. Cappelli (U. Pisa), e G. Bifulco (U. Salerno) hanno illustrato rispettivamente nuovi sviluppi metodologici per

lo studio della chiralità molecolare e studi dedicati al design di inibitori selettivi; la sessione congiunta con la Divisione di Chimica Fisica si è invece avvalsa dei contributi di G. Brancato (Scuola Normale), sulla modellazione di materiali soffici e M. Aschi (U. dell'Aquila), sulla modellazione di processi di trasferimento elettronico. Infine, la sessione congiunta plenaria con la Divisione di Chimica Farmaceutica, è stata incentrata sulla lezione plenaria di M. Sansom (U. Oxford) dedicata alla modellazione multiscala di sistemi proteici, seguita dalle comunicazioni di L. De Gioia (U. Bicocca) sulla modellazione delle idrogenasi e D. Montanari (Aptuit) sulla connessione tra target affinity e proprietà molecolari dei farmaci.

La DCTC intende sviluppare le proprie attività secondo due direttive primarie: la diffusione ed il riconoscimento della cultura chimica teorica e computazionale italiana e lo sviluppo di strumenti di interconnessione e rete tra i chimici teorici e computazionali del nostro Paese. Al fine di favorire il riconoscimento delle rilevanti attività nel settore teorico e computazionale, anche e soprattutto tra i giovani ricercatori, è stato pertanto indetto il Premio "C. Roetti", volto a premiare l'attività complessiva di ricerca dei chimici teorici under 40.

Il Premio Roetti è stato assegnato durante i lavori della Divisione a I. Ciofini (ENSP Parigi). Infine, nel corso della Tavola Rotonda "Verso una rete integrata della chimica computazionale italiana" (a cura di A. Laganà, A. Polimeno) sono state esplorate le attuali modalità di collaborazione e networking tra chimici teorici e computazionali italiani, nell'ambito dei consorzi di ricerca, reti internazionali ed istituti di ricerca.

