

# SCI2021: CHIMICA DELL'AMBIENTE E DEI BENI CULTURALI

a cura del Presidente, del Direttivo e di E. Bolzacchini, delegato di Divisione

***Si riportano le tematiche, aspetti metodologici e ambiti di applicazione e alcuni risultati presentati nell'ambito delle sessioni organizzate dalla Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali in occasione del Congresso SCI2021.***

La Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali ha contribuito al Congresso con 60 comunicazioni orali e 40 presentazioni poster. Sono state ospitate due sessioni congiunte, una con la Divisione di Chimica Fisica, l'altra con la Divisione di Chimica Industriale. Le comunicazioni orali, comprensive di una relazione ad invito e due keynote, sono state strutturate in sessioni di cui due *inclusive* di Chimica dei Beni Culturali e di Chimica dell'Ambiente, le altre parallele così come per le sessioni poster.

## ***Chimica dei Beni Culturali***

Le comunicazioni inerenti alla Chimica dei Beni Culturali hanno focalizzato l'importanza della diagnostica avanzata. In particolare, sono stati presentati lavori di ricerca focalizzati sia su coloranti antichi (studiati mediante dispersive liquid-liquid microextraction) che moderni, come ad esempio i coloranti ACNA (analizzati attraverso spettroscopia Raman e analisi HPLC-MS) oltre a pitture ad olio commerciali e pitture spray impiegate nella *Urban Art*. Per tipologie di materiali più tradizionali, sono stati presentati nuovi sviluppi di metodi cromatografici, spettroscopici e di studio delle proprietà magnetiche effettuati su fibre tessili e rimedi farmaceutici antichi, burattini storici indiani e pigmenti organici come il *Caput Mortuum*.

Nell'ambito della caratterizzazione di oggetti in leghe metalliche, sono stati presentati protocolli di indagini capaci di far luce sulla complessità delle stratificazioni e sui processi di corrosione in atto. Molti lavori si sono avvalsi di misure non-invasive e micro-invasive, consentendo di ridurre il campionamento diretto di materiale dalle opere. L'utilizzo di "LA-ICP-MS imaging" per lo studio dei fenome-

ni di degrado di vetri storici ha portato a risultati molto promettenti e innovativi; da segnalare l'interesse per i fenomeni di bio-corrosione di bronzi esposti all'aperto, ad opera di comunità di batteri epilitici. Alcuni lavori hanno contemplato reperti archeologici per comprendere le tecniche esecutive utilizzate per la realizzazione di affreschi romani ad Aquileia o di vasi attici nell'antica Agrigento.

Nella sessione comune con la divisione di Chimica Fisica, rilevante è stato lo sviluppo di nuovi materiali per la conservazione ed il restauro, green ed a basso impatto ambientale a partire da materie prime naturali o ottenute da fonti rinnovabili. È stata presentata una nuova schiuma prodotta a partire dall'agar, caratterizzata in termini di proprietà reologiche e rilascio di acqua. Nanotubi di allosite (nano argille) sono stati proposti come substrato sostenibile per lo sviluppo di protettivi innovativi in grado di reagire a stimoli esterni e di agenti pulenti a lento rilascio. Un gel per la rimozione di resine terpeniche da dipinti, ottenuto miscelando 3 poli idrossibutirati con solventi green come il gamma valerolattone, è stato ottimizzato imbevendolo in due strati di tessuti elettrofilati al fine di migliorare la maneggevolezza ed aumentare la capacità di rimozione del materiale. L'utilizzo di solventi green e non tossici ha trovato applicazione anche nell'ambito del restauro cinematografico. In particolare, solventi DES (deep eutectic solvents) sono stati efficacemente impiegati per la rimozione di residui di gelatina degradata dal supporto di pellicole cinematografiche.

Alcune presentazioni hanno riguardato lo sviluppo di metodi di conservazione e restauro in ambiti ancora poco esplorati. Nel campo del restauro monumentale è stato presentato un innovativo sistema di

desalinizzazione basata sull'utilizzo di un set up a doppio anodo e catodo. Nel settore degli interventi di restauro di oggetti conservati outdoor sono stati testati protettivi commerciali per valutare le loro performance e la durevolezza dell'azione protettiva su beni ceramici esposti all'aperto. Altro ambito di attenzione riguarda il consolidamento di reperti ossei. La possibilità di utilizzare soluzione di idrossiapatite in presenza di nanoparticelle di idrossido di calcio ha consentito, infatti, di evitare l'uso di polimeri di sintesi inutilizzabili per successiva datazione dei reperti.

La caratterizzazione della qualità dell'aria nei siti museali rimane un argomento attuale sia per i metodi di misura che per le tecnologie di controllo. La caratterizzazione della qualità dell'aria in ambienti museali è testimoniata da uno studio sul sito espositivo milanese di un'importante opera pittorica del Novecento, Quarto Stato di Pellizza da Volpedo, con un confronto delle frazioni di PM all'interno e all'esterno della teca. È stato anche presentato il monitoraggio della qualità dell'aria presso il Santuario della Beata Vergine dei Miracoli di Saronno. Di particolare novità, uno studio sulle possibili interazioni fra soluzioni sanificanti a base alcolica utilizzate per la sanificazione anti-covid19 e i materiali artistici (sete nello specifico) e un contributo sull'effetto della deposizione di PM sulla corrosione dei manufatti in bronzo in ambiente confinato; una correlazione è stata trovata tra le caratteristiche del particolato, quali composizione e concentrazione, e il comportamento a corrosione in esperimenti di invecchiamento artificiale.

Sono stati presentati anche i risultati di due progetti europei, il "PROCRAFT project: conservation strategies of aircraft heritage from excavation to museum" e il "CAPuS project: research and higher education allied for the Conservation of Art in Public Spaces".

### Chimica dell'Ambiente

Le comunicazioni riguardanti la Chimica dell'Ambiente hanno coperto un'ampia varietà di argomenti, privilegiando l'ambiente acquatico e quello atmosferico, pur includendo anche il suolo, sia attraverso lavori sperimentali che modellistici. Particolare attenzione è stata rivolta a tecniche e tecnologie per la prevenzione e il risanamento ambientale.

Una serie di lavori ha evidenziato una problematica spesso trascurata, i.e. la trasformazione di sostanze farmaceutiche durante i trattamenti negli impianti di depurazione delle acque reflue. I sartani, ad esempio, una classe di farmaci anti-ipertensivi, durante i processi terziari di clorazione possono originare importanti sottoprodotti che sono stati caratterizzati mediante spettroscopia 2D-NMR e spettrometria di massa. Nell'ambito delle tecnologie di recupero di nuova materia, i fanghi derivati dai processi depurativi primari sono stati riconosciuti fonte di lipidi che possono essere convertiti in biocombustibili. Ottimizzando la metodologia di estrazione, è possibile recuperare il 90% dei lipidi *trans*-esterificabili, mentre la frazione residua post-estrazione è ancora valorizzabile mediante processi di digestione anaerobica attraverso la formazione di biogas. Altre comunicazioni con al centro la depurazione basata sulla digestione anaerobica hanno mostrato che la frazione liquida del digestato può essere reintrodotta nella filiera di trattamento delle acque reflue promuovendo la crescita di microalghe in grado di abbattere BOD<sub>5</sub> e ridurre la tossicità iniziale.

Il tema della valorizzazione degli scarti è stato declinato anche attraverso lo studio di nuovi bio-polimeri, completamente compostabili, caratterizzati da buone proprietà meccaniche e di barriera, che li rendono idonei alla produzione di imballaggi per il confezionamento alimentare, come il poli(dietilene 2,5-furanoato) (Fig. 1), sintetizzato a partire dal dimetil estere dell'acido 2,5-furandicarbossilico e dal dietilenglicole. Per quanto riguarda il riutilizzo delle acque reflue piovane, in alternativa all'acqua potabile, per applicazioni come la pulizia o il giardinaggio, gli studi presentati hanno mostrato la presenza di diversi microrganismi patogeni che ne limitano l'applicazione. Processi di tipo Fenton e foto-Fenton sono efficaci nella rimozione dei batteri, ma acidificano l'acqua con elevati costi energetici. I risultati ottenuti da un nuovo processo solare foto-Fenton con un catalizzatore in grado di lavora-

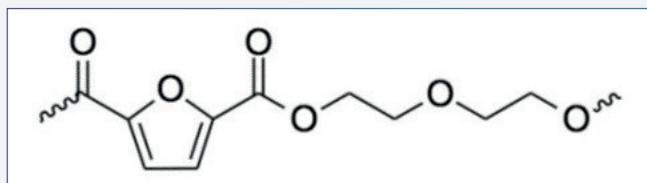


Fig. 1 - Struttura del poli(dietilene 2,5-furanoato)

re a pH neutro mostrano un basso costo energetico ed alta efficienza nella rimozione di patogeni. Altro “hot topic”, oggetto di numerose comunicazioni, gli inquinanti organici emergenti, e.g. interferenti endocrini, ritardanti di fiamma, pesticidi e dolcificanti artificiali, tensioattivi e nanoparticelle ingegnerizzate, rimossi solo parzialmente e con difficoltà dagli impianti di trattamento di acque reflue e che vengono così introdotti nell’ambiente. È stato proposto il trattamento enzimatico per ridurre la concentrazione di questi contaminanti mediante laccasi, che funzionano con un’ampia varietà di substrati aromatici, sono molto stabili, e non sono attaccati da inibitori quindi adatti per applicazioni biotecnologiche. Le fosfotriesterasi sono invece degli enzimi in grado di idrolizzare pesticidi come gli organofosfati. È stato proposto anche l’uso dei metal organic frameworks (MOFs) a base di Fe(III) e Zn(II), i.e. materiali porosi definiti da ioni metallici o cluster inorganici collegati tramite linker organici rigidi. I MOFs sono stati utilizzati per adsorbire l’ofloxacina come antibiotico modello. È stato proposto un pretrattamento con UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> per il trattamento di acque industriali contaminate da tensioattivi non ionici poco biodegradabili. Modificando le condizioni sperimentali, è possibile trasformare il tensioattivo in sottoprodotti biodegradabili e successivamente ridurre il COD in modo da rispettare i limiti allo scarico. I trattamenti di ossidazione avanzata come la fotocatalisi possono validamente sostituire l’assorbimento con carbone attivo granulare. Un catalizzatore a base di TiO<sub>2</sub> supportato su una rete di acciaio inossidabile è stato sperimentato su scala pilota per la rimozione di idrocarburi policiclici aromatici (IPA) e policlorobifenili (PCB). Per i PCB i risultati sono simili alla degradazione con UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, mentre per gli IPA il trattamento più efficiente è quello a base UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Sono stati presentati altri contributi relativi al trattamento di reflui industriali attraverso processi ossidativi, in particolare il foto-Fenton e l’ozonizzazione finalizzata ad aumentare la biodegradazione. Nel primo caso è stata mostrata l’efficacia di un nuovo complesso metallico con l’imminodisuccinato che risulta efficace a pH neutro mentre nel secondo caso sono stati mostrati i risultati sperimentali relativi alla sinergia di un processo biologico innovativo a biomassa granulare potenziato con ossidazione ad ozono per il trattamento di un refluo industriale.

Ulteriori comunicazioni si sono focalizzate sul trattamento fotocatalitico acque sotterranee contaminate utilizzando un nuovo catalizzatore di TiO<sub>2</sub> modificato, sullo sviluppo di un nuovo fertilizzante con una struttura interna inorganica di alluminosilicati che consente il rilascio di nutrienti nel terreno, sull’abbattimento di NO<sub>2</sub> mediante materiali compositi di polianilina/TiO<sub>2</sub> e sul reimpiego di residui derivanti dalla pirolisi di rifiuti nella formulazione degli asfalti al fine di aumentarne la durata, sulla messa a punto di un protocollo sperimentale per ridurre l’incertezza nelle misure della concentrazione di odori, nell’ambito di un circuito interlaboratorio (Proficiency Test). I risultati ottenuti sono in accordo con la norma EN 13725 e l’utilizzo di un dispositivo che crea una sorta di atmosfera “sintetica” consente di ottenere valori di Z-score più bassi nei Proficiency Test.

Non sono mancate comunicazioni sullo sviluppo di aspetti modellistici rilevanti per la chimica ambientale. Sono state illustrate le potenzialità della Life Cycle Assessment (LCA) applicate ai materiali plastici, l’impiego di modelli chimici predittivi della distribuzione ambientale di inquinanti organici emergenti e l’applicazione di algoritmi di machine-learning per lo studio del processo di eutrofizzazione.

Le comunicazioni focalizzate sul comparto atmosfera hanno incluso contributi riguardanti lo studio di persistenza e rimozione del virus SARS-CoV-2 nel bioaerosol mediante processi basati su radiazione UV; la caratterizzazione mediante la tecnica a diffrazione di raggi X della frazione inorganica del PM<sub>10</sub> e PM<sub>2,5</sub> generate dai freni degli autoveicoli; la rimozione di PM<sub>x</sub> mediante barriere vegetali; il tasso di riscaldamento dell’atmosfera causato dalla composizione chimica degli aerosol supportato da dati sperimentali di aerosol relativi ai Tropici e all’Artico.

### SCI2021: Chemistry of the Environment and Cultural Heritage

Topics, methodological approaches and applications, and some results from the oral and poster communications in the sessions SCI2021 organized by the Division of Chemistry of the Environment and Cultural Heritage, are reported.

# UN CONGRESSO DI GIOVANI NELLA DIVISIONE DI CHIMICA ANALITICA

a cura del Presidente e del Direttivo della Divisione

***È stata una scelta azzeccata l'organizzazione del congresso divisionale per giovani fatto da giovani. La qualità delle presentazioni e la capacità dei giovani di presentare con alto senso critico e professionalità i risultati del loro lavoro di ricerca hanno fatto emergere nuove direzioni di ricerca, una notevole contaminazione interdisciplinare ed una eccellente qualità delle pubblicazioni.***

***La chimica analitica è in una fase di interessante cambiamento sia scientifico che generazionale.***

Il congresso divisionale ha avuto inizio con le lectures di indirizzo e visione dei Proff. Luigia Sabbatini dell'Università di Bari e Luigi Mondello dell'Università di Messina, entrambi premiati rispettivamente col premio alla Carriera e con la medaglia Canneri. Dopo l'introduzione ai lavori del Presidente prof. Minero, che ha ricordato come con l'inedita formula del congresso via web il Direttivo abbia strutturato un congresso di giovani per i giovani, e per questo abbia assegnato 50 borse di studio per l'iscrizione al Congresso di giovani ricercatori, dottorandi e borsisti, i lavori della Divisione di Chimica Analitica si sono svolti su 15 sessioni parallele<sup>1</sup> per la durata complessiva di 5 giorni, ciascuna moderata da 2 chairmen. Sono state organizzate 10 Invited Lectures e 12 Keynotes. I contributi pervenuti sono stati selezionati dal Direttivo e sono stati suddivisi in 137 Contributi Orali e 100 contributi Poster.

Nelle 3 sessioni dedicate alla LC/MS, alle tecniche multidimensionali, alla preparazione del campione e alle fasi stazionarie e alla loro selettività, è stato presentato il know-how e gli sviluppi competitivi diretti alle sempre più pressanti "prestazioni" richieste dal mercato, in particolare nell'arricchimento e separazione di peptidi con modifiche post-traduzionali, metaboliti, allergeni in campioni biologici, prodotti naturali e "novel food" mediante tecniche multidimensionali di cromatografia liquida accoppiata a spettrometria di massa. Si è anche discusso di cromatografia magnetica per la separazione di microparticelle e cellule, della scelta del-

le fasi mobili per le separazioni enantioselettive e dell'effetto della polarità della fase stazionaria per la separazione di cannabinoidi. Un grande numero di presentazioni ha riguardato le tecniche cromatografiche multidimensionali comprehensive GCxGC accoppiate a spettrometria di massa, ad esempio per la caratterizzazione di olii minerali in integratori lipidici ricchi di omega-3, anche a rapporto isotopico e MS a bassa risoluzione per la determinazione simultanea di svariate decine di pesticidi in differenti matrici vegetali. Sono stati presentati anche lavori su tecniche MS ad alta risoluzione per analisi untargeted. La preparazione del campione ha ancora un ruolo fondamentale, come dimostrato dai lavori presentati su nuovi nanomateriali e polimeri ad impronta molecolare.

Il focus della sessione "Ohmics e Farmaceutica" è stato dedicato alle scienze omiche, quali peptidomica, lipidomica, metabolomica, proteomica e metaproteomica sullo sviluppo di tecnologie analitiche di frontiera basate sulla HPLC accoppiata a MS ad elevata risoluzione, insieme all'introduzione di nuove discipline analitiche di "data mining" sull'enorme quantità di dati prodotti in questi approcci. Sono state anche discusse tecniche emergenti basate sulla cromatografia preparativa multicolonna per la purificazione in continuo di biofarmaci.

Il tema della tutela della sicurezza e qualità degli alimenti è stato sviluppato in una sessione "Alimenti", in cui sono state riportate le applicazioni di LC, GC e SFC accoppiate alla spettrometria di massa, oltretutto di CZE e CI capillare combinate con ap-

<sup>1</sup>L'organizzazione temporale e i contributi sono riportati in modo sinottico alla pagina web <https://www.soc.chim.it/it/divisioni/analitica/home>, come pure le relazioni dei gruppi divisionali e interdivisionali

procci bioinformatici, e le ricerche innovative sulla caratterizzazione dei novel food (alghe ed insetti), e il loro potenziale rischio allergenico, sul recupero di biomolecole dagli scarti, sulla realizzazione di packaging attivo, la rilevazione di pesticidi, additivi e microplastiche in diverse matrici, e l'analisi del profilo delle componenti volatili e non volatili di olio e birra.

Nella sessione "Ambiente" sono state mostrate le necessità e gli sviluppi di tecniche analitiche con alta sensibilità che necessitano di piccole quantità di campione per avere alta risoluzione nei profili temporali di carotaggi antartici, l'identificazione e lo sviluppo di conoscenza dei processi ambientali, e l'applicazione a processi di abbattimento innovativo di reflui, con l'ausilio anche di analisi chemiometrica.

La sessione di "Chemiometria" è stata aperta con le keynote di due giovani ricercatrici che hanno introdotto, rispettivamente, la selezione di variabili in ambito multi-block e l'analisi di immagini iperspettrali. Le presentazioni hanno illustrato svariate strategie di analisi dei dati supervised e unsupervised, con focus sul software chemiometrico, e toccando numerosi ambiti applicativi (ambientale, alimentare, clinico).

I contributi scientifici nella sessione di "Equilibri chimici e Speciazione" hanno mostrato il loro ruolo attuale in campo ambientale, medico-biologico, tecnologico-industriale, principalmente attraverso la modellazione e previsione del comportamento chimico, dell'attività biologica e/o dell'impatto ambientale di differenti ioni metallici ed organometallici, composti biologicamente attivi e farmaci, e inquinanti, in sistemi reali complessi, come acque naturali, reflui, fluidi biologici.

I contributi per la conservazione dei "Beni Culturali" hanno riguardato i recenti sviluppi nei metodi di indagine in grado di operare con procedure micro-distruttive su oggetti d'arte costituiti da materiali sia inorganici che organici, il ruolo di nanomateriali nella protezione di manufatti artistici di natura lapidea, e nuovi algoritmi per il restauro digitale di pellicole soggette a processi di degrado.

La sessione dedicata all'"Elettroanalitica" è stata ricca di contributi su temi come la discriminazione di specie chirali, la quantificazione di cannabinoidi, la caratterizzazione di strutture supramolecolari, l'elettrosintesi di idrossidi doppi a strato per

applicazioni in diverse matrici, la realizzazione di sensori indossabili, dispositivi cartacei e tecniche inkjet per la produzione di sensori a basso costo. È stata organizzata anche una sessione congiunta con la Divisione di Elettrochimica.

Le tre sessioni su "Sensori e Biosensori" hanno evidenziato il grande sviluppo di dispositivi che consentono di affrontare problematiche di ampio rilievo e grande impatto sulla società civile, come la pandemia da SARS-CoV-2 o la gestione di patologie come il cancro. Lo sviluppo di approcci bio-sensoristici sempre più efficaci, semplici e compatibili con le esigenze derivanti da un uso su ampia scala dei sensori è stato declinato a) con lo sviluppo di nuovi metodi di trasduzione, ad esempio basati su transistor organici; b) il miglioramento delle prestazioni di sistemi di trasduzione ottica ed elettrochimica mediante l'uso di nuovi nanomateriali; c) il miglioramento della selettività con lo sviluppo di nuovi recettori quali sistemi ad impronta molecolare o enzimi chimerici per progettare nuovi approcci diagnostici, come ad esempio l'uso di semplici oligonucleotidi per l'attivazione di meccanismi di comunicazione tra sistemi biomolecolari che potrebbero costituire le basi per lo sviluppo di nuovi metodi di rivelazione; d) lo sviluppo di nuovi dispositivi diagnostici adatti ad un ampio mercato, basati sull'uso di supporti a base di derivati di cellulosa o di carta, compatibili con produzioni a basso costo, ma anche con l'integrazione in saggi diagnostici su matrici reali. Ulteriori contributi hanno evidenziato le grandi opportunità per la biosensoristica offerte dal sistema CRISPR/Cas oltre che dall'integrazione del biosensore su supporti non rigidi e compatibili con lo sviluppo di dispositivi diagnostici indossabili.

Nella sessione di "Bionalitica" sono stati presentati gli aspetti innovativi delle tecniche bioanalitiche, del campionamento e del trattamento del campione nonché della caratterizzazione di sostanze considerate emergenti e di interesse nelle discipline analitiche, ambientali, cliniche, nutraceutiche e tossicologiche. Rilevanza è stata data anche alle tecniche di screening che stanno assumendo un ruolo sempre più importante sia a livello accademico che industriale.

I contributi della sessione di "Spettroscopia Analitica" hanno comprovato come molti metodi spettroscopici siano oggi in grado di fornire informazioni di significativa importanza per lo studio di campio-

ni caratterizzati da un'elevata complessità chimica, come nanomateriali, alimenti, fluidi biologici e sistemi cellulari, e per migliorare le attuali possibilità nell'ambito della sintesi di materiali avanzati, della diagnostica clinica e dei controlli per la sicurezza alimentare.

In occasione della Assemblea dei Soci e aderenti alla Divisione, la Divisione ha conferito diversi premi<sup>2</sup>. Durante l'assemblea si sono tenute le relazioni annuali dei Gruppi Divisionali e Interdivisionali, alcuni ricchi di iniziative scientifiche nonostante il periodo pandemico.

### **A congress of Young Researchers in the Analytical Chemistry Division**

The organization of the Divisional congress for young people made by young people was a good choice. The quality of the presentations and the ability of young researchers to present their work with a high critical sense and competence have led to rise new research directions, a notable interdisciplinary contamination and an excellent quality of publications. Analytical chemistry is facing an interesting scientific and generational change.

<sup>2</sup>Dal 2021 lo "Storico delle Medaglie e dei Premi conferiti dalla Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana (SCI)" è disponibile al link: [https://www.soc.chim.it/it/divisioni/analitica/albo\\_d\\_oro](https://www.soc.chim.it/it/divisioni/analitica/albo_d_oro).



# LA CHIMICA FISICA: SCIENZA E SOCIETÀ

Giovanni Marletta, Presidente  
Moreno Meneghetti, Vice-Presidente  
Elena Selli, Past-President

***La Divisione di Chimica Fisica ha partecipato ai lavori del Congresso Nazionale con più di 140 contributi orali, in 12 sessioni, e più di 60 presentazioni poster, evidenziando il forte contributo della Chimica Fisica a tematiche di grande attualità come Materiali e Nanomateriali, Biomateriali, Sistemi Biologici, Energia, Ambiente, e Beni Culturali. 15 Keynotes su invito hanno autorevolmente promosso il dibattito delle sessioni.***

La Divisione di Chimica Fisica ha organizzato 12 sessioni tematiche, ospitando 143 contributi orali, e 61 poster. Molti dei contributi sono arrivati da giovani ricercatori, anche incoraggiati dalle 40 borse di studio a loro riservate. Le Sessioni sono state costruite sulla base di contenuti e numerosità dei contributi ricevuti, fornendo al contempo un quadro aggiornato delle linee di tendenza attuali delle principali aree di ricerca della comunità nazionale di Chimica Fisica. Si sono, dunque, individuate le macro-aree di ricerca più "frequentate" e di grande impatto sociale, come la Chimica Fisica dei Materiali e Nanomateriali, la

Chimica Fisica per la Biomedicina, per i Biomateriali, per l'Energia, per l'Ambiente, per i Beni Culturali, nonché le tematiche trasversali della ricerca in Termodinamica e Cinetica Chimica e delle Metodologie ed applicazioni delle Spettroscopie.

A conferma dell'interesse ampio e trasversale degli approcci metodologici propri alla Chimica Fisica, due dei Plenary Lecturers del Congresso, Ralf Metzler del Theoretical Physics Institute, University of Potsdam, Germania (scelto come Speaker per l'Elsevier's Lecture), e Luis Liz Marzan, del CIC biomaGUNE, San Sebastián, Spagna, sono stati proposti dalla Divisione,

affiancando i due Premi Nobel Wittingham e Hoffmann, e gli altri prestigiosi Lecturers scelti per le Sessioni comuni del Congresso.

Ogni sessione tematica è stata introdotta da Keynote Lecturers invitati, che hanno presentato argomenti di particolare interesse rispetto ai successivi contributi della Sessione. In particolare: La sessione di “Chimica Fisica per i Nanomateriali” è stata introdotta dalla keynote di Marco Laurati dell’Università di Firenze, nella quale sono state studiate le interazioni tra basi di DNA in un sistema modello in cui le catene di DNA erano legate alla superficie di nanoparticelle di polistirene (Fig. 1).

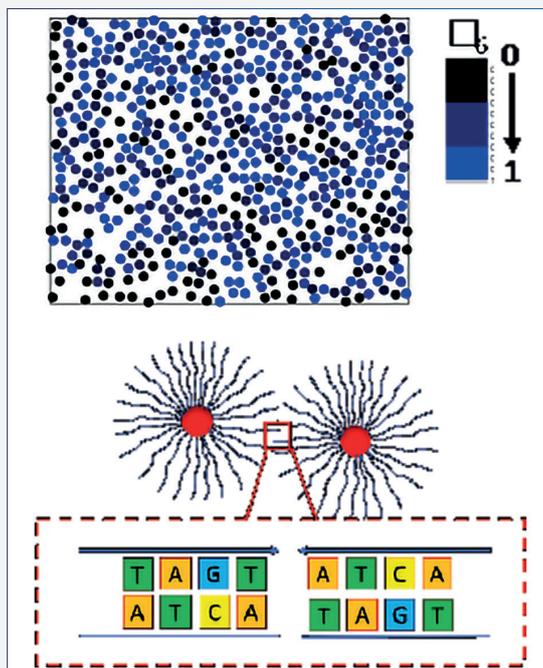


Fig. 1 - Dal contributo di Marco Laurati

La Lecture di Paola Sassi dell’Università di Perugia, ha introdotto la sessione di “Chimica Fisica per la Biomedicina”, mostrando come delle spettroscopie classiche possono essere utilizzate per rilevare segnali di avvertimento di problematiche mediche.

Per stessa tematica, Debora Scuderi del CNRS-Université Paris Saclay ha mostrato nuove tecniche per la ionizzazione di biomolecole da studiare con Spettroscopia di Massa Tandem.

La keynote di Emanuela Gatto dell’Università di Roma Tor Vergata ha introdotto la sessione “Enerchem” parlando di biomolecole come materiali per la generazione di fotocorrenti (Fig. 2).

La sessione di “Chimica Fisica per l’Ambiente” è stata aperta dall’intervento di Luigi Gentile dell’Università di Bari, che ha riportato un processo con solventi green per la separazione di cellulosa da sorgenti vegetali. Cataldo Simari dell’Università della Calabria ha introdotto la sessione di “Chimica Fisica per l’Ambiente e i materiali”, parlando di una tematica di particolare attualità nel campo ambientale come quella dei materiali per la

cattura di un gas serra quale l’anidride carbonica.

Il contributo di Luciano Galantini dell’Università di Roma La Sapienza ha invece introdotto la sessione di “Chimica Fisica per i Materiali”, riportando risultati di studi sui fenomeni di self-assembly supracolloidale (Fig. 3).

Nella sessione di “Metodologie ed applicazioni delle Spettroscopie”, Elena Groppo dell’Università di Torino ha rivalutato l’utilizzo di molecole sonda per caratterizzare siti attivi di catalizzatori eterogenei per la polimerizzazione di olefine (Fig. 4).

La “sessione di Chimica Fisica dei Beni Culturali” è stata

aperta da Gabriella Di Carlo dell’Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati del CNR dell’area di ricerca di Roma, riportando soluzioni nanotecnologiche per contrastare l’ossidazione delle armature di monumenti in calcestruzzo.

La “sessione di Chimica Fisica dei Biomateriali” ha visto le Keynotes di Roberto De Santis dell’Istituto di Polimeri Compositi e Biomateriali del CNR di Napoli e di Julietta Rau dell’Istituto di Struttura della Materia del CNR di Roma, illustrando il primo gli avanzamenti di interfacce bioingegnerizzate e di dispositivi biomedici 3D, e la seconda i risultati ottenuti nello sviluppo di materiali nanostrutturati biomimetici per le strategie di rigenerazione e sostituzione di tessuti.

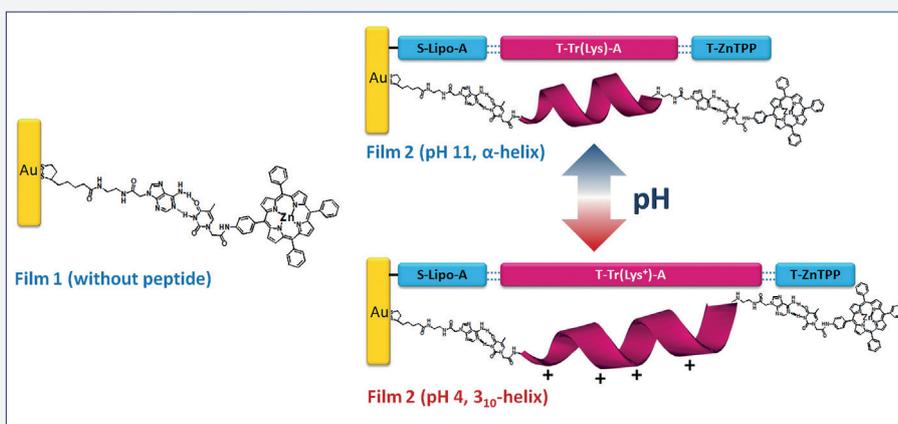


Fig. 2 - Dal contributo di Emanuela Gatto

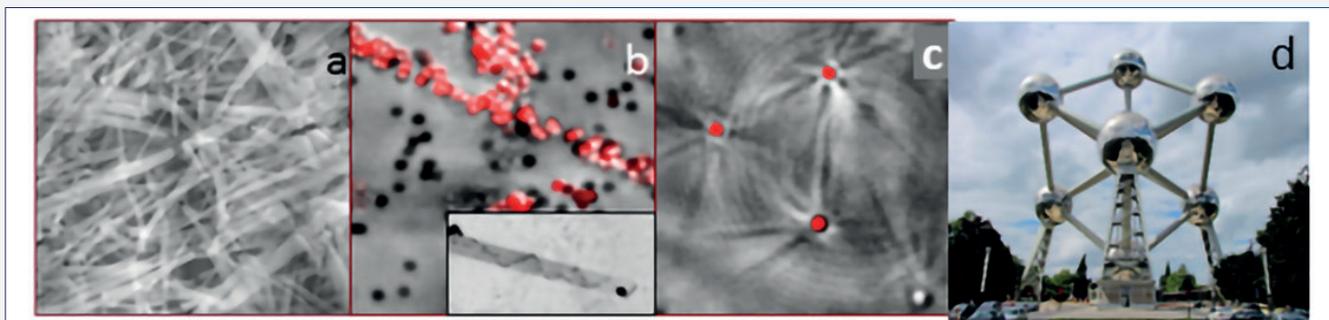


Fig. 3 - Dal contributo di Luciano Galantini

Infine, nella “sessione Termodinamica e Cinetica Chimica”, la Lecture di Andrea Scorciapino dell’Università della Calabria ha riportato un modello per descrivere gli equilibri chimici ai lati di una membrana lipidica e delle specie che possono diffondere attraverso di essa.

Una parte dell’attività della Divisione di Chimica Fisica è stata, inoltre, dedicata all’organizzazione di Joint Sessions insieme alle Divisioni di Chimica Teorica e Computazionale, di Elettrochimica, di Chimica dei Sistemi Biologici e di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali.

Queste sessioni hanno creato terreno concreto di confronto tra i contributi presentati alla Divisione di Chimica Fisica con quelli presentati, su tematiche simili, nelle sessioni di altre Divisioni, consentendo un proficuo scambio di competenze e, in prospettiva, possibili sinergie e collaborazioni materiali.

In particolare, nella sessione comune con la Divisione di Elettrochimica, Maria Vittoria Dozzi dell’Università di Milano ha riportato lo sviluppo di nuovi fotoanodi per la conversione dell’energia solare.

Nella sessione comune con la Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici, Roland Winter del Department of Chemistry and Chemical Biology, Dortmund University ha parlato del ruolo della separazione di fase liquido-liquido di proteine e proteine miste ad acidi nucleici utili a descrivere processi di auto-assemblamento cellulare.

Infine, nella sessione comune con la Divisione di Chimica Teorica e Computazionale, George E. Froudakis del Department of Chemistry, University of Crete, ha mostrato l’importanza di usare dati artificiali per migliorare le presta-

zioni di approcci “Machine Learning” che predicono, a bassi costi, le proprietà di nuovi materiali.

Sulla base dei contributi orali e poster, sono stati assegnati i Premi della Divisione:

- “Distinguished Physical Chemistry Awards” (DPCA) riservati agli autori, di età superiore ai 40 anni, delle 4 comunicazioni orali che si sono particolarmente distinte per originalità e chiarezza, rispettivamente a Cristina Artini (Università di Genova), Elisabetta Collini (Università di Padova), Alessandra Forni (SCITEC-CNR, Milano) e Nunzio Tuccitto (Università di Catania);
- “Young Physical Chemistry Awards” (YPCA) per i migliori contributi orali presentati da giovani ricercatori di età inferiore ai 40 anni, a Ilaria Clemente (Università di Siena), Chiara Lo Porto (Università di Bari), Francesco Tavani (Università di Roma “La Sapienza”) e Eleonora Vottero (Università di Torino);
- “Premio Senatore”, riservato ai migliori poster presentati da giovani ricercatori, che non abbiano superato i 32 anni di età, assegnato a Tommaso Bianconi (Università di Perugia), con menzione anche per i poster presentati da Elisa Fresch (Università di Padova) ed Elena Cambiotti (Università di Perugia).

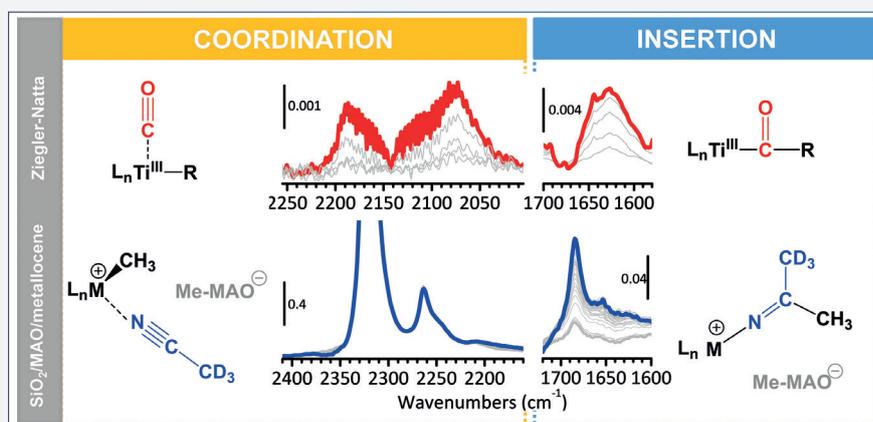


Fig. 4 - Dal contributo di Elena Groppo

- assegnato ex-aequo il “Premio Semerano”, per la miglior Tesi di Dottorato presentata nell’anno precedente, a Marco Fornasier (Dottorato presso l’Università di Cagliari) e Annalisa Polo (Dottorato presso l’Università di Milano).

Infine, la Medaglia Bonino, che costituisce il riconoscimento di maggior prestigio per la Chimica Fisica italiana ed è conferita annualmente dal Direttivo della Divisione ad uno scienziato italiano maggiormente distintosi per attività di ricerca, di formazione e organizzativa per la Chimica Fisica, è stata assegnata al professor Salvatore Coluccia, già Professore Ordinario e attualmente Professore Emerito dell’Università di Torino, “per il grande e duraturo contributo scientifico nel campo dello studio mediante tecniche avanzate spettroscopiche e di microscopia elettronica di superfici di materiali, con particolare riferimento ai materiali per la catalisi e ai biomateriali, e per la sua particolarmente intensa, continua e lungimirante attività organizzativa e di orientamento della comunità chimico-fisica e chimica nazionale, caratterizzata come è stata da una grande attenzione

all’impatto della Chimica fisica e della chimica sulla società”.

Concludiamo constatando che molto consistente è stato il contributo della Chimica Fisica al Congresso Nazionale della SCI e molto rilevanti e di ampia ricaduta sociale sono stati i risultati, e ambedue le cose testimoniano la forte vitalità e l’importanza della Chimica Fisica nella Società Chimica Italiana e, più in generale, nella Chimica nel nostro Paese.

#### Physical Chemistry: Science and Society

The Physical Chemistry Division contributed with more than 140 oral contributions, in 12 sessions, and more than 60 poster presentations, highlighting the strong contribution of Physical Chemistry to hot areas as Materials and Nanomaterials, Biomaterials, Biological Systems, Energy, Environment and Cultural Heritage. 15 Invited Keynotes authoritatively prompted the discussion of the sessions.

## CONGRESSO NAZIONALE SCI 2021 - DIVISIONE DI CHIMICA INDUSTRIALE

Martino Di Serio, Presidente della Divisione di Chimica Industriale

**La Divisione di Chimica Industriale ha partecipato al Congresso Nazionale SCI 2021 organizzando 7 sessioni. Le sessioni sono state programmate in collaborazione con i Gruppi Interdivisionali di Catalisi, di Green Chemistry ed Enerchem. Una sessione è stata organizzata anche con la Divisione Chimica dell’Ambiente e di Beni Culturali. La partecipazione è stata numerosa con 10 keynote, 45 presentazioni orali e 41 poster. Durante il convegno sono stati assegnati anche i premi della Divisione. I 4 premiati hanno tenuto anche 3 delle 10 keynote del congresso.**

La prima keynote è stata quella della dr.ssa Nicoletta Ravasio (CNR - ISTC, Milano) premiata con la Medaglia Pino che ha tenuto una conferenza dal titolo: “Catalysis and Green Deal”.

Il dr. Carlo Perego (ENI SpA), premiato con la Chini Lecture nella sessione coorganizzata con il Grup-

po Interdivisionale Enerchem, ha tenuto una conferenza dal titolo: “CO<sub>2</sub> utilization: from waste to resource”.

“Waste to chemicals: a low-carbon innovative solution for circularity” è stato titolo della conferenza dell’Ing. Gaetano Iaquaniello (NextChem) e della

Prof.ssa Siglinda Perathoner (Università di Messina), premiati con la medaglia Levi.

Il prof. Walter Cabri (Università di Bologna) nella sua keynote nella sessione organizzata con il Gruppo Interdivisionale di Catalisi ha illustrato l'utilizzo di catalizzatori a base di palladio per una produzione sostenibile dei prodotti farmaceutici. Nella stessa sessione il dr. Pierdomenico Biasi (Casale Sa) ha descritto come l'industria e l'università possono collaborare nel settore dello sviluppo della catalisi per raggiungere risultati di successo.

Nella sessione organizzata con il Gruppo di Green Chemistry il prof. Rafael Luque (Universidad de Cordoba) ha evidenziato come il modello dell'economia circolare possa portare a sviluppi industriali di successo. Nella stessa sessione il prof. Volker Hessel (University of Adelaide) nella sua keynote ha messo in evidenza le potenzialità della flow chemistry e della chimica del plasma nello sviluppo di processi sostenibili.

Il prof. Michele Laus (Università del Piemonte Orientale "A. Avogadro") ha aperto la sessione dedicata alla Scienza dei Polimeri con una keynote sull'utilizzo dei polimeri per la modifica delle proprietà delle superfici.

L'utilizzo del LCA per l'analisi e il miglioramento dei processi chimici è stato l'argomento della keynote che il prof. Fabrizio Passarini (Università di Bologna) ha tenuto in apertura della sessione organizzata con la Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali.

Nella sessione conclusiva della Divisione di Chimica Industriale il dr. Paolo Vacca ha descritto le attività della SAES Getters SpA nel settore dell'utilizzo delle zeoliti per la chimica sostenibile.

I temi affrontati nelle diverse sezioni sono stati in linea con le keynote ed hanno riguardato argomenti di forte interesse soprattutto per gli aspetti legati allo sviluppo sostenibile. Le comunicazioni sono state tenute nella maggior parte dei casi da giovani ricercatori che hanno mostrato la vitalità del settore della Chimica Industriale. La presenza tra gli oratori, sia delle keynote che delle presentazioni orali, di colleghi dell'industria conferma la vicinanza della Divisione al mondo industriale, vicinanza che andrà sempre più consolidata.

Proprio nell'ottica della collaborazione con il mondo industriale la Divisione di Chimica Industriale, insieme alla Divisione di Chimica Farmaceutica e

a Federchimica, ha organizzato l'Evento Satellite "Valorizzazione di scarti di filiere produttive". Nell'evento sono state affrontate le valorizzazioni degli scarti della filiera dell'edilizia e della filiera dell'agroalimentare.

Le relazioni sono state tenute sia da ricercatori che da responsabili di aziende coinvolte nei due settori. Il dr. Giorgio Ferrari (Mapei SpA) ha mostrato le potenzialità presenti nell'utilizzo degli scarti della filiera dell'edilizia. L'argomento è stato poi approfondito dal prof. Gilberto Artioli (Università di Padova) sulle sinergie possibili delle filiere dell'edilizia e dell'industria metallurgica. Gli aspetti ambientali legati all'utilizzo di aggregati riciclati sono stati evidenziati dalla prof.ssa Sabrina Sorlini e dalla dr.ssa Alessandra Diotti (Università di Brescia).

La valorizzazione degli scarti della filiera dell'agroalimentare è stata introdotta dal prof. Piero Campiglia (Università di Salerno). La dr.ssa Giuliana D'Ippolito (CNR) ha riportato esempi di approcci biobased per la valorizzazione dell'industria agroalimentare. Il dr. Franco Cavazza (ILSA SpA) ha descritto l'utilizzo dei sottoprodotti dell'agroalimentare per produzione di biostimolanti e idrolizzati proteici. Il recupero di orzo dopo germinazione per la produzione di fertilizzanti e biostimolanti è stato presentato dalla dr.ssa M. Rosaria Stile (Adriatica SpA).

L'evento si è chiuso con una tavola rotonda coordinata dalla dr.ssa Manuela Melucci (ISOF-CNR, Bologna). Gli argomenti trattati sono stati di forte interesse per i partecipanti e la Divisione di Chimica Industriale si è impegnata ad organizzare altri eventi sulla valorizzazione degli scarti, rivolgendosi anche ad altri settori industriali.

### SCI2021 - Industrial Chemistry Division

The Industrial Chemistry Division participated in the SCI 2021 National Congress organizing 7 sessions. The sessions were planned in collaboration with the Interdivisional Groups of Catalysis, Green Chemistry and Enerchem. A session was also organized with the Chemical Division of the Environment and Cultural Heritage. Participation was large with 10 keynotes, 45 oral presentations and 41 posters. Division prizes were also awarded during the conference. The 4 winners also held 3 of the 10 keynotes of the congress.

# IL CONTRIBUTO DELLA DIVISIONE DI CHIMICA INORGANICA

Emma Gallo, Francesco Ruffo, Delegati SCI2021 della Divisione di Chimica Inorganica  
Alceo Macchioni, Presidente della Divisione di Chimica Inorganica

***La partecipazione corale ai lavori della Divisione di Chimica Inorganica in seno al XXVII Congresso della Società Chimica Italiana (SCI2021) ha evidenziato la vivacità scientifica e l'innata interdisciplinarietà della comunità di riferimento. Ne è risultato un quadro variegato, che ha rappresentato le aree tematiche di attuale interesse della comunità dei chimici inorganici, delineando gli sviluppi futuri indirizzati a raccogliere le sfide derivanti dalle esigenze della società in ambiti quali la sostenibilità, i cambiamenti climatici e l'energia.***

Premessa doverosa alla stesura di questo documento è la contestualizzazione del momento storico in cui ha avuto luogo SCI2021. Il Congresso è stato organizzato on-line, supportato da una consolidata piattaforma per la trasmissione di eventi a distanza, sulla scia dell'evento pandemico che ha fortemente condizionato tutte le attività scientifiche e congressuali degli ultimi due anni. Il perdurare di questa inattività avrebbe potuto farne prendere le distanze da parte di una platea dinamica e abituata a frequenti occasioni di confronto, con il rischio di partecipazione scarsa o distratta.

Al contrario, la Divisione di Chimica Inorganica ha partecipato coralmente a SCI2021. In linea con la sua natura multidisciplinare, il Consiglio Direttivo, che si è occupato di organizzare l'evento, ha posto attenzione a far risaltare le diverse anime scientifiche che compongono la Divisione, strettamente interconnessa con le altre Divisioni della Società Chimica Italiana. Ne è quindi risultato un quadro variegato, che ha restituito una rassegna ampia e attuale di tutti gli aspetti tipici della disciplina, che comprendono la chimica bioinorganica, di coordinazione e organometallica, e dei materiali e le loro applicazioni in catalisi, nella produzione di energia da fonti rinnovabili e di processi ecosostenibili, affrontati attraverso un approccio integrato teorico-sperimentale.

I lavori della Divisione si sono svolti nelle quattro mattinate del 15, 17, 21 e 23 settembre in un orario compreso tra le 9,30 e le 13. Le giornate sono state divise in modo da consentire una sessione comune, all'inizio e alla fine della giornata, dedicata alla

celebrazione di premi o a conferenze su invito. Il corpo centrale è stato invece suddiviso in tre sessioni parallele, con comunicazioni orali di quindici minuti ciascuna.

È stato così possibile conferire i numerosi e ambiti premi divisionali, a scienziati di caratura internazionale o a giovani ricercatori. La prestigiosa Medaglia Sacconi è stata attribuita a Frank Neese (Max Planck Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr) che ha mostrato come la chimica quantistica, la teoria del campo dei leganti e la spettroscopia possano fornire informazioni essenziali per la comprensione di meccanismi di reazione anche dei sistemi catalitici più impegnativi, inclusi i metalloenzimi.



Fig. 1 - La Prof.ssa Sessoli e il Dr. Ravera mostrano la medaglia Malatesta e la medaglia Nasini e le relative pergamene

Il premio Malatesta, alla sua prima edizione e indirizzato a scienziati che abbiano ottenuto risultati di eccellenza in uno o più settori della Chimica Inorganica, è stato assegnato a Roberta Sessoli (Università di Firenze), come riconoscimento per la sua ricerca pionieristica sul ruolo degli effetti quantici nel controllo dell'anisotropia magnetica e sull'interconnessione tra spin e chiralità (Fig. 1).

Hanno dato prestigio alla manifestazione le conferenze su invito di Anke Weidenkaff (Technical University of Darmstadt), che ha presentato la progettazione di materiali sostenibili ad alte prestazioni per processi di sintesi e di produzione in linea con l'economia circolare, David Giedroc (Indiana University), relatore circa i suoi studi sui meccanismi molecolari della metallostasi batterica, e Viktoria Gessner (Ruhr-Universität Bochum), che ha presentato una rassegna su ilidi metallati, quali efficaci reagenti per la stabilizzazione di specie reattive, appartenenti ai gruppi principali, e di leganti in catalisi.

I riconoscimenti alla carriera per ricercatori under 40 (Premio Nasini) e alle migliori tesi di Dottorato sono stati assegnati per entrambi gli anni 2020 e 2021, vista la mancata organizzazione del convegno divisionale nel 2020 e la conseguente impossibilità di svolgere le relative cerimonie. I premi hanno visto la partecipazione di numerosi ricercatori talentuosi, come hanno potuto constatare le Commissioni istituite ad hoc che hanno dovuto vagliare attentamente la documentazione prodotta prima di poter selezionare i premiati, data l'elevata qualità scientifica di tutti i candidati. Il premio Nasini 2020 ha visto protagonista Enrico Ravera (Università di Firenze), per i suoi significativi e originali contributi nell'ambito dello sviluppo e dell'applicazione delle tecniche di risonanza magnetica per la caratterizzazione di materiali inorganici bioispirati. Invece, Edoardo Mosconi (CNR-SCITEC, Perugia) si è aggiudicato il Premio Nasini 2021, in virtù delle sue importanti ricerche nell'ambito della modellazione teorico-computazionale di molecole e materiali complessi per applicazioni nel fotovoltaico di nuova generazione (Fig. 2).

I premi per le migliori tesi di Dottorato (tre per l'anno 2020, e tre per il 2021) hanno dato visibilità alle tre anime della Divisione di Chimica Inorganica, quali quelle relative alla chimica di coordinazione, alla chimica dei sistemi biologici e alla chimica dei materiali. I vincitori per l'anno 2020 sono Anna



Fig. 2 - Il Dr. Mosconi (sinistra, vincitore della Medaglia Nasini 2021) e il Prof. Macchioni (destra, Presidente della Divisione di Chimica Inorganica) mostrano la medaglia e la pergamena del premio Nasini

Dall'Anese (Università di Trieste), Giacomo Picci (Università di Cagliari) e Fortuna Ponte (Università della Calabria), mentre per l'anno 2021 sono stati premiati Fabio Pirro (Università di Napoli Federico II), Alessandra Barbanente (Università di Bari "Aldo Moro") e Matteo Vanni (CNR-ICCOM, Sesto Fiorentino). Tutti i giovani oratori hanno presentato con chiarezza e rigore i risultati delle loro ricerche. Le sessioni parallele hanno previsto la partecipazione di 84 oratori provenienti omogeneamente da tutte le sedi di Italia, universitarie o di centri di ricerca, con interessi distribuiti in modo omogeneo tra i vari ambiti tematici. Sono stati coinvolti sia giovani sia consolidati studiosi, e, per alcuni di questi, è stato attribuito l'appellativo 'ad hoc' ('hoc' = 'hot oral communication') alla corrispondente comunicazione, come riconoscimento al valore della loro attività scientifica. Tre oratori, Thomas Scattolin (Università di Venezia Ca' Foscari), Andrea Biffis (Università di Padova) e Roberto Esposito (Università di Napoli Federico II) hanno, invece, ricevuto i premi editoriali messi in palio dalle case editrici Wiley-VCH e Frontiers Media. Anche in questo caso, la selezione ha previsto il lavoro di opportune commissioni, che hanno valutato il curriculum di un'ampia gamma di valenti candidati.

Le sessioni parallele sono state arricchite dalle attività interdivisionali, a testimonianza della multidisciplinarietà dei contesti scientifici della Divisione

di Chimica Inorganica. Il giorno 15 è stato infatti dedicato a incontri del Gruppo Interdivisionale di Chimica Organometallica, il giorno 17 ha visto protagonista il Gruppo Interdivisionale di Chimica per le Energie Rinnovabili, mentre una sessione del giorno 21 è stata condivisa da oratori appartenenti alle Divisioni di Chimica dei Sistemi Biologici e di Chimica Teorica e Computazionale. Come già sottolineato, gli ambiti scientifici discussi nel corso di queste comunicazioni hanno riguardato tutti quelli prevalenti della disciplina, inquadrati secondo prospettive contemporanee e di sicuro avvenire.

Il programma scientifico è stato completato dalle sessioni poster con oltre ottanta contributi, e, nel corso dell'assemblea divisionale, è stata conferita la Medaglia d'oro divisionale "Croatto" al Professor Elio Giamello in riconoscimento alla sua dedizione all'attività della Divisione e del suo impegno costante per la crescita della Chimica Inorganica italiana. Nel complesso, i lavori svolti nell'ambito della Divisione

di Chimica Inorganica sono apparsi culturalmente stimolanti e ben inseriti nel panorama più ampio e variegato espresso dall'intera comunità dei chimici italiani.

### **The Contribution from the Inorganic Chemistry Division**

The choral participation in the work of the Division of Inorganic Chemistry at the XXVII Congress of the Italian Chemical Society (SCI2021) highlighted the scientific liveliness and innate interdisciplinarity of the community. The result was a diverse picture that represented the current thematic areas of interest of the inorganic chemistry community, outlining future developments aimed at meeting the challenges arising from society's needs in areas such as sustainability, climate change and energy.

---

## **DIVISIONE DI CHIMICA ORGANICA A SCI2021**

Valeria D'Auria, Presidente Divisione di Chimica Organica

***Si è da poco conclusa la XXVII Edizione del Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, durante la quale si sono svolti i lavori della Divisione di Chimica Organica e in questo breve editoriale verrà presentato un breve rendiconto scientifico di tali lavori.***

**L**a XXVII Edizione del Congresso Nazionale della SCI è stata caratterizzata da un'elevatissima partecipazione in termini di iscritti e di sottomissione di richieste di contributi per comunicazioni orali e comunicazioni poster.

Anche se non è ancora stato estrapolato il numero di iscritti soci della Divisione di Chimica Organica, su circa 2100 iscritti al Congresso, il dato relativo alla richiesta di contributi orali e contributi poster sottomessi dai soci della nostra Divisione, 177 e 83, rispettivamente, è un numero senza precedenti che

sicuramente testimonia il vivo interesse dei soci della Divisione nei confronti del Congresso.

In considerazione di tali numeri, abbiamo proposto al Consiglio Centrale della Società Chimica Italiana una congrua espansione degli spazi inizialmente assegnati ai lavori della nostra Divisione per consentire, come da nostra tradizione, la possibilità al maggiore numero di iscritti di presentare i risultati delle loro ricerche.

Ringrazio il Presidente della SCI Gaetano Guerra per aver accettato la nostra proposta.

I lavori della Divisione di Chimica organica si sono articolati in 6 mezze giornate su due settimane dal 15 al 23 settembre, con 6 sessioni plenarie e 21 sessioni parallele.

Alla pagina [http://sci2020.org/media/attachments/2021/09/14/sci\\_book-abstract\\_p3.pdf](http://sci2020.org/media/attachments/2021/09/14/sci_book-abstract_p3.pdf) è possibile consultare il programma analitico delle singole sessioni e gli abstracts dei contributi orali e poster.

L'organizzazione di un programma divisionale così ricco e articolato è stato possibile grazie all'impegno e alla professionalità dei due delegati della Divisione di Chimica Organica, Proff. Alessandro Abboto e Andrea Pace.

In sintesi, i lavori della Divisione sono iniziati nel pomeriggio del 15 settembre con la proclamazione, a sessioni unificate, dei vincitori dei premi e delle medaglie della Divisione di Chimica organica. Sono stati assegnati: la Medaglia d'oro Giorgio Modena a Pierangelo Metrangolo (Politecnico di Milano); la Medaglia d'oro Angelo Mangini a Paolo Tecilla (Università di Trieste); la Medaglia d'oro Adolfo Quilico a Anna Bernardi (Università di Milano); la Medaglia d'argento Giacomo Ciamician a Pierangelo Gobbo (Università di Bristol); i premi alla Ricerca per la "Chimica Organica per l'Ambiente, l'Energia e le Nanoscienze" (premio Senior a Francesco Giacalone, Università Palermo, premio Junior a Sara Meninno, Università di Salerno, premio Tesi di Dottorato a Mirko Maturi); i premi alla Ricerca per la "Chimica Organica nei suoi Aspetti Metodologici" (premio Senior a Marco Lucarini, Università di Bologna, premio Junior a Manuel Orlandi, Università di Padova, premio Tesi di Dottorato a Gabriele Laudadio, Università di Pavia); i premi alla Ricerca per la "Chimica Organica per le Scienze della Vita" (premio Senior a Daniela Montesarchio, Università di Napoli, premio Junior a Elena Lenci, Università di Firenze, premio Tesi di Dottorato ad Anna Esposito); i premi alla Ricerca per la "Chimica Organica per lo Sviluppo di Processi e Prodotti nell'Industria" (premio Senior ad Jacopo Roletto, PROCOS e premio Junior a Nicolas D'Imperio, DiPharma).

Le motivazioni per l'assegnazione dei premi sono riportate alla pagina: [https://www.soc.chim.it/divisioni/organica/medaglie\\_premi/medaglie\\_premi2021](https://www.soc.chim.it/divisioni/organica/medaglie_premi/medaglie_premi2021).

Il momento di conferimento dei premi e medaglie e la lettura delle motivazioni è sempre un momento

solenne e molto emozionante: la nostra comunità assegna il meritato riconoscimento ai propri ricercatori più valenti che si sono distinti in vari ambiti tematici e in varie fasi della loro vita per i brillanti risultati delle loro ricerche. Come sempre, è stato un momento molto sentito e partecipato: la prima sessione divisionale, svolta a sessioni unificate, caratterizzata dalla conferenza di apertura della vincitrice della medaglia Quilico Anna Bernardi e da 8 comunicazioni orali, è stata la sessione che ha registrato il quarto numero di presenze di tutto il Congresso, preceduta soltanto dalle sessioni plenarie 1, 2 e 3, che coinvolgevano tutti gli iscritti al Congresso.

Le attività della Divisione sono proseguite nelle mattine di giovedì 16 settembre, lunedì 20 settembre e giovedì 23 settembre e nei pomeriggi di venerdì 17 settembre e martedì 20 settembre con le conferenze a sessioni unificate dei vincitori di premi e medaglie e con 21 sessioni parallele di comunicazioni orali.

Una sessione parallela del 17 settembre è stata dedicata alle attività del Gruppo interdivisionale di Chimica organometallica. In questa sessione è stata ascoltata la conferenza della vincitrice del Premio 2021 EurJOC Young Researcher Lecture Prize, supportato da Chemistry Europe, Allegra Franchino, selezionata dal gruppo interdivisionale tra un'ampia rosa di candidature sottomesse.

Una sessione parallela del 20 settembre è stata dedicata alle conferenze selezionate dal gruppo interdivisionale Enerchem, mentre una sessione parallela del 21 settembre è stata dedicata alle conferenze selezionate dal gruppo interdivisionale di Green Chemistry.

Nella mattinata del 16 settembre si è svolta su piattaforma Cisco Webex l'assemblea dei Soci della Divisione, un tradizionale momento di incontro con la comunità per un rendiconto delle attività svolte e della situazione finanziaria e per la presentazione delle attività in programmazione. L'assemblea ha registrato una partecipazione di oltre 100 Soci.

Alcune considerazioni sul programma scientifico. La modalità telematica ha consentito di espandere notevolmente la configurazione delle sessioni divisionali di solito assegnate nell'ambito del Congresso SCI. Conseguentemente le sessioni divisionali della Divisione di Chimica Organica hanno offerto una panoramica di ampio respiro sulle varie tematiche di

ricerca che vedono coinvolti i soci della nostra Divisione. Le conferenze hanno abbracciato una molteplicità di temi di grande interesse e attualità, quali lo sviluppo di protocolli di sintesi efficienti e selettivi e ad elevata sostenibilità, la progettazione razionale di piccole molecole di interesse farmacologico, lo sviluppo di materiali e nanomateriali per applicazioni in ambito opto-elettronico e biomedico, lo sviluppo di metodologie di indagine strumentale, l'esplorazione della chemodiversità e del potenziale biotecnologico e farmaceutico delle sostanze naturali. Le sessioni sono state organizzate secondo le seguenti macrotematiche, anche se va sottolineato che la maggior parte delle presentazioni ha mostrato un forte carattere multidisciplinare: scienze della vita, sintesi e catalisi, metodologie di sintesi, materiali, chimica verde, chimica supramolecolare. Un Congresso di così ampie dimensioni ha consentito, inoltre, a molti giovani ricercatori non strutturati nella fase iniziale della loro esperienza di ricerca di presentare, in alcuni casi per la prima volta in un congresso di carattere nazionale, il pro-

prio progetto. L'attribuzione da parte del Direttivo della Divisione di 50 borse di studio, a copertura della quota di iscrizione dei giovani under 35 che avevano sottomesso una comunicazione, ha incentivato tale partecipazione attiva, che, sicuramente, rappresenta una tappa fondamentale nel processo formativo di giovani ricercatori.

In conclusione, non posso che esprimere un pieno apprezzamento della presente edizione del Congresso che, pur con i limiti della modalità telematica, ha rappresentato, dopo un anno di fermo, un evento di grande rilievo scientifico e di eccezionale partecipazione di pubblico.

#### **Organic Chemistry Division at SCI2021**

The XXVII Edition of the National Congress of the Italian Chemical Society has just ended, during which the works of the Organic Chemistry Division took place and in this short editorial a brief scientific report of these works will be reported.

---

## **DIVISIONE DI CHIMICA DEI SISTEMI BIOLOGICI, 2021**

Jussara Amato, Danilo Milardi, Michael Assfalg

***Con grande piacere e soddisfazione la Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici ha potuto quest'anno riprendere le attività congressuali dopo l'interruzione forzata dello scorso 2020. L'occasione è stata un punto di incontro e di confronto per tutto il mondo della chimica in Italia su argomenti di grande attualità.***

**N**ell'ambito del Congresso Nazionale della SCI, svoltosi in modalità telematica, le attività della Divisione sono state articolate in sessioni di mezza giornata distribuite nelle due settimane del convegno. L'organizzazione dei lavori è stata curata dai delegati della Divisione, Prof.ssa Jussara Amato e Dott. Danilo Milardi, mentre sono stati coinvolti come moderatori tutti i membri del Consiglio Di-

rettivo. La tematica del convegno è stata assai ampia, comprendendo i più diversi ambiti di interesse per la chimica dei sistemi biologici, quali struttura e funzione di biomolecole, basi molecolari delle malattie, biotecnologie, nanobiotecnologie, interazioni macromolecolari, biologia computazionale. Sessioni dedicate ad ambiti specifici sono state organizzate in collaborazione con: Divisione di



Fig. 1 - A sx: Dr. Luca Mazzei, vincitore Premio De Santis 2020; a dx: Dr. Claudia Bonfio, vincitrice Premio De Santis 2021

Chimica Inorganica, Divisione di Chimica Fisica e Gruppo Interdivisionale di Biotecnologie. Abbiamo avuto l'onore di ospitare sei *keynote speakers* e due assegnatari di premio. Il programma scientifico comprendeva, inoltre, 30 presentazioni orali, selezionate fra le tante proposte ricevute e numerose presentazioni e-poster. Come di consueto, hanno preso parte alle attività scienziati di spicco nella comunità internazionale ed un gran numero di giovani, 20 dei quali hanno usufruito di borse messe a disposizione dalla Divisione per la partecipazione al convegno.

Nell'ambito del convegno si è svolta la cerimonia di assegnazione del premio Italfarmaco "Gastone De Santis", rivolto a giovani ricercatrici e ricercatori che si sono distinti per contributi scientifici di grande interesse per la Chimica dei Sistemi Biologici. I vincitori delle edizioni 2021 e 2020 (Fig. 1) sono stati invitati a presentare il proprio lavoro, ospiti della Divisione. Gianluca Caprini (Italfarmaco) ha presentato i premiati. Il premio 2020 è stato assegnato a Luca Mazzei dell'Università di Bologna, il quale ha illustrato le sue ricerche condotte sull'ureasi, un enzima contenente nichel, che svolge un ruolo centrale nel ciclo dell'azoto catalizzando l'idrolisi dell'urea per dare ammoniaca e anidride carbonica. Gli studi di Mazzei hanno fornito dettagli strutturali del complesso enzima-substrato che contribuiscono alla comprensione del meccanismo catalitico e gettano le basi per la progettazione di nuovi inibitori selettivi dell'ureasi per applicazioni antibatteriche. Il premio 2021 è stato assegnato a Claudia Bonfio della University of Cambridge per i suoi studi di carattere chimico-biologico riguardanti l'origine della vita. Bon-

fio ha proposto reti di reazioni potenzialmente prebiotiche in cui i componenti di cellule primitive avrebbero potuto accumularsi spontaneamente, interagire e produrre nuove specie, che hanno permesso l'emergere di cellule con funzionalità sempre più avanzate.

Gli interventi dei 6 relatori su invito sono risultati di particolare interesse per la comunità scientifica appartenente alla Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici. Durante la sua

relazione, la Prof.ssa Rommie Amaro, dell'Università della California San Diego, ha discusso dei suoi recenti lavori finalizzati all'uso della microscopia computazionale per studiare il virus SARS-CoV-2 in dettaglio atomico, con l'obiettivo di comprendere meglio il riconoscimento molecolare del virus e dei recettori delle cellule ospiti, il legame e il design degli anticorpi e la ricerca di nuove terapie antivirali. La Prof.ssa Paola Turano, Università di Firenze, ha invece descritto i suoi recenti studi sulle proprietà delle ferritine come molecole "carga" per la somministrazione mirata di farmaci. In Natura, le ferritine sono attori importanti nell'omeostasi del ferro. Concentrano il ferro all'interno della loro cavità dove esso può svolgere alcune delle sue varie funzioni vitali per il corretto funzionamento della cellula. Le superfici esterne delle "nanogabbie" di ferritina possono anche essere funzionalizzate chimicamente per conferire a questi sistemi nuove attività biologiche. Il Prof. Luc Brunsveld, dell'Università di Eindhoven è intervenuto ad apertura della sessione organizzata in collaborazione con il Gruppo Interdivisionale di Biotecnologie della SCI. L'intervento ha illustrato come studi combinati di sintesi organica, chimica delle proteine, biologia strutturale e chimica supramolecolare possono fornire informazioni preziose per la comprensione e la regolazione delle interazioni proteina-proteina (PPI) con l'obiettivo di sviluppare una chimica medicinale innovativa. Il successivo intervento della Dr.ssa Elena Sgaravatti, PlantaRei Biotech Srl, Padova, ha descritto i rischi inerenti allo sfruttamento intensivo dei terreni legato all'esigenza di soddisfare le necessità alimentari della crescente popolazio-

ne mondiale. Infatti, poiché la popolazione globale continua ad aumentare e l'offerta di terreno agricolo è limitata, il compito di garantire la sicurezza alimentare e nutrizionale diventa sempre più impegnativo. È quindi urgente e critica l'adozione di tecniche colturali innovative, come colture cellulari vegetali, *vertical farming* ecc., che consentano produzioni vegetali sicure con il massimo risparmio di risorse come acqua, suolo e solventi e, dall'altro, il riutilizzo e la sapiente valorizzazione del sottoprodotto alimentare all'interno di una filiera quanto più circolare possibile. La sessione congiunta organizzata in collaborazione con la Divisione di Chimica Inorganica è stata aperta dalla relazione della Prof.ssa Angela Casini, Technical University of Munich, che ha riassunto i più recenti risultati riguardanti l'eliminazione riduttiva catalizzata da Au(III) in mezzi acquosi, fornendo le basi concettuali per lo sviluppo e l'uso di alcuni complessi di Au(III) per la modifica efficiente delle proteine. Questi complessi dell'oro, sia di coordinazione che organometallici, sono emersi come strumenti promettenti per catalizzare molte reazioni biochimiche, in quanto dotati di eccellente reattività e selettività, compatibilità all'interno di un mezzo di reazione acquoso, cinetiche veloci delle reazioni di scambio di ligandi e condizioni di reazione blande. Il Prof. Amedeo Caflisch, University of Zurich, ha infine aperto la sessione congiunta con la Divisione di Chimica Fisica, parlando dei più recenti sviluppi nel settore dei *software* per lo studio del *docking* di librerie di piccole molecole con diversi *target*. Per mezzo di un *software* innovativo sono stati identificati inibitori di piccole molecole di sei bromodomini umani, moduli proteici che legano le code degli istoni acetilati. Nel caso del bromodominio CREBBP, la validazione dei risultati iniziali mediante indagini sperimentali ha portato a diversi derivati ad alta affinità e selettività nei confronti di target simili, che hanno poi mostrato significativa attività antitumorale in modelli animali (Fig. 2).

Le 30 comunicazioni orali e i 20 poster hanno visto contributi da parte di ricercatori provenienti da svariate università e istituti di ricerca nazionali, ed hanno coperto tutti i campi di maggiore attualità nell'ambito della chimica orientata allo studio dei sistemi biologici.

Sono stati descritti nuovi meccanismi d'azione in processi biochimici rilevanti e discusse le basi del



Fig. 2 - Keynote speakers: Prof.ssa Paola Turano, Dott.ssa Elena Sgaravatti, Prof.ssa Angela Casini, Prof. Amedeo Caflisch

riconoscimento molecolare tra biomolecole. Sono stati presentati e discussi risultati di studi sulla caratterizzazione strutturale di proteine e acidi nucleici non convenzionali e delle loro interazioni con molecole capaci di modularne l'attività biologica. Numerosi sono stati anche i contributi mirati alla sintesi e caratterizzazione di molecole farmacologicamente attive di derivazione sia naturale che sintetica con potenziali applicazioni in campo biomedico, non solo con finalità terapeutiche, ma anche per una maggiore comprensione dei meccanismi molecolari responsabili dell'insorgenza di malattie. Parte delle discussioni si è incentrata anche su sviluppo e caratterizzazione di biomateriali e loro applicazioni in campo biomedico e tecnologico. Sono stati infine presentati studi volti alla progettazione e identificazione di nuove molecole con specifiche proprietà biologiche, basati sull'impiego di tecniche bioinformatiche avanzate, simulazioni di dinamica molecolare e *docking*.

È possibile, pertanto, riassumere l'attività scientifica presentata come il risultato di una combinazione di metodi di indagine tradizionali con una forte componente innovativa tecnologica, rappresentata anche dall'impiego di metodi informatici di analisi e gestione dei dati.

L'integrazione di metodi chimici e conoscenze biologiche si è confermata anche in questa occasione determinante per il raggiungimento di nuovi interessantissimi risultati nelle bioscienze. Le presentazioni sono state tutte di elevato valore scientifico con contenuti innovativi e multidisciplinari, a dimostrazione della vivacità scientifica e culturale della Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici. La presenza attiva di numerosi giovani ricercatori con competenze trasversali fa intravedere un futuro brillante per la Divisione e per la disciplina. A nome del Direttivo della Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici ringraziamo vivamente tutti co-

loro che hanno contribuito a rendere unico questo evento.

### **Division of Chemistry of Biological Systems, 2021**

With great pleasure and satisfaction, this year the Division of Chemistry of Biological Systems was able to resume congress activities after the forced interruption of 2020 due to the pandemics. The meeting was a great opportunity of discussion on topics of great relevance for the community of chemistry in Italy.

## **LA DIVISIONE DI DIDATTICA AL CONGRESSO SCI 2021**

Margherita Venturi

Dipartimento di Chimica "Giacomo Ciamician" – Università di Bologna  
Presidente della Divisione di Didattica della Società Chimica Italiana (SCI)

***Al contrario di ogni aspettativa, la modalità online utilizzata per il Congresso SCI 2021 si è rivelata vincente anche per la Divisione di Didattica che, nel suo piccolo, è riuscita ad organizzare sessioni interessanti, difficilmente realizzabili in presenza, con una plenary lecture, tre invited lecture, e ben due Tavole Rotonde registrando un numero di "presenti a distanza" veramente inaspettato.***

### **Una considerazione iniziale**

Il XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana è la dimostrazione lampante che si può fare di necessità virtù. Infatti, nessuno avrebbe pensato che la modalità online avrebbe dato buoni risultati per il congresso della nostra società, che normalmente richiama tanti iscritti. Al contrario, tutto è andato magnificamente e i partecipanti sono stati molti di più di quelli che la più rosea delle previsioni avrebbe fatto sperare. Il successo si deve sicuramente al fatto che la modalità online ha permesso di preparare un programma ricchissimo e di avere fra gli speaker scienziati di grandissima levatura. Anche la Divisione di Didattica, nel suo piccolo, sfruttando questa occasione è riuscita ad

organizzare sessioni interessanti (difficilmente realizzabili in presenza) con una plenary lecture, tre invited lecture, 15 comunicazioni orali e due Tavole



le Rotonde. I nostri sforzi sono stati ampiamente ripagati perché abbiamo registrato un numero di “presenti a distanza” veramente inaspettato. Ma andiamo per ordine.

### Cosa abbiamo ascoltato e “visto”

Nell’ambito del congresso il programma della Divisione di Didattica ha impegnato tre mezze giornate, precisamente il 15, 17 e 21 settembre, che si sono svolte nelle ore pomeridiane, dalle 15 alle 18, per favorire la partecipazione dei docenti di scuola che di mattina sono occupati con le lezioni.

Il primo pomeriggio è cominciato con la plenary lecture di Jan Apotheker, esperto ben noto di didattica e presidente della Commissione di Didattica Chimica della IUPAC; nella sua relazione dal titolo “Developments in chemistry education” il relatore ha parlato della necessità di sviluppare un’azione educativa centrata sullo studente e di affrontare temi di grande attualità e rilevanti dal punto di vista sociale ed etico. In altre parole, Jan ha sottolineato che, per attirare l’interesse degli studenti, occorre utilizzare la didattica laboratoriale e insegnare una chimica “viva”.

L’importanza di affrontare temi legati agli aspetti etici e sociali è stata anche l’oggetto della relazione di Mariano Venanzi, professore di Chimica Fisica all’Università Tor Vergata di Roma, intitolata, con un’arguta scelta di parole, “Chimica sostenibile per una didattica universitaria sostenibile”. Secondo il relatore, e non si può che essere d’accordo con lui, l’introduzione di argomenti di questo tipo può diventare un mezzo per rivedere in maniera innovativa i curricula dei corsi universitari; inoltre, permet-

te di sostituire un approccio spesso troppo focalizzato sugli aspetti teorici disciplinari, con una didattica legata maggiormente alle applicazioni e ai problemi che la Chimica si trova ad affrontare in una società complessa come la nostra.

Il pomeriggio si è concluso con nove comunicazioni brevi tutte centrate su interessanti sfide didattiche quali, ad esempio, il concetto di legame chimico (al quale, fra l’altro è stata dedicata la Scuola Segre del 2020), le

basi della meccanica quantistica, l’approccio storico-epistemologico per introdurre la spettroscopia anche in DAD, la differenza fra coloranti naturali e artificiali e problemi connessi di tossicità e sostenibilità.

Il secondo pomeriggio, che è stato molto denso di attività, è iniziato con la relazione di Carlo Fiorentini, presidente del Centro di Iniziativa Democratica degli Insegnanti di Firenze, dal titolo “L’insegnamento della chimica nella prospettiva della cittadinanza”; il relatore ha sottolineato che l’adeguatezza cognitiva delle conoscenze e un approccio metodologico-relazionale problematico sono fondamentali per costruire le competenze di cittadinanza; permettono, infatti, di avere la necessaria apertura mentale e il coinvolgimento emotivo, di riconoscere il valore del confronto e del dialogo, di attribuire importanza alle ipotesi provvisorie, di assumere atteggiamenti non dogmatici e rigidi, di imparare a cooperare nella costruzione della conoscenza, di valutare il grado di certezza che si può attribuire alle affermazioni fatte e di sviluppare l’autodisciplina. Il relatore ha, inoltre, dimostrato l’importante contributo che l’insegnamento della chimica può fornire per costruire tutto ciò.

Sono quindi seguite quattro comunicazioni brevi, due delle quali focalizzate sull’importanza di un approccio interdisciplinare all’insegnamento della chimica, in particolare una “rivisitazione chimica” della Divina Commedia di Dante e un’attività laboratoriale centrata sui composti del carbonio ispirata al capitolo del Sistema Periodico di Levi dedicato appunto all’elemento carbonio. Le altre due comunicazioni hanno invece mostrato l’importanza

a qualsiasi livello della formazione delle strategie didattiche, sia formali che informali, per coinvolgere e motivare gli studenti a studiare chimica.

*Dulcis in fundo*, il pomeriggio si è concluso con una Tavola Rotonda dal titolo “Chimica: come, dove, quando e perché”, il cui obiettivo è stato quello di mostrare il vero volto della Chimica che non è quella cosa guardata con grande sospetto e diffidenza dal cittadino e neanche quella materia poco amata

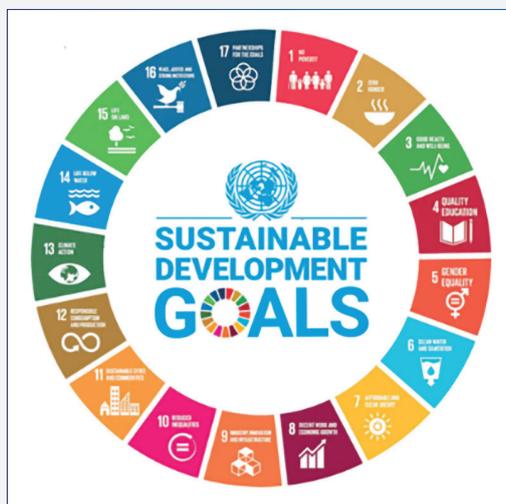




Fig. 1 - Tavola Rotonda “Chimica: come, dove, quando e perché”. Riga in alto da sinistra: Silvia Bencivelli, Paola Govoni, Valentina Domenici e Piersandro Pallavicini. Riga in basso da sinistra: Pellegrino Conte, Silvia Borsacchi e Veronica Cremonesi

dagli studenti; si tratta invece di una disciplina importante, utile e bella; importante perché ci spiega come è fatto e come funziona il mondo, compreso l'uomo; utile perché con i prodotti creati dai chimici permea ogni aspetto della nostra vita rendendola più facile e piacevole; bella perché ci permette di entrare nel meraviglioso mondo dell'infinitamente piccolo facendo da tramite a tutte le altre discipline scientifiche. Come insegnare la Chimica, come farla amare a scuola, come poter eliminare discriminazioni di genere, come contrastare la diffusione di “fake news” e come far apprezzare questa disciplina anche al pubblico dei non addetti ai lavori sono stati gli aspetti affrontati. La Tavola Rotonda (Fig. 1) è stata coordinata egregiamente dalla giornalista Silvia Bencivelli che ha stimolato con le sue domande le relatrici e i relatori scelti opportunamente per le loro differenti competenze. Paola Govoni, docente di Storia della Scienza e delle Tecniche all'Università di Bologna, unica non chimica fra chimici, ha affrontato il tema dei rapporti tra scienza e società e del coinvolgimento delle donne in ambito scientifico; Valentina Domenici, docente di Chimica all'Università di Pisa, ha mostrato come i musei scientifici rappresentano un ambiente stimolante e particolarmente efficace per entrare nel mondo della chimica; Piersandro Pallavicini, docente di Chimica all'Università di Pavia, ha spiegato come un chimico può diventare uno scrittore parlando dei tanti esempi che si possono trovare in ambito nazionale e internazionale; infine, con Pellegrino Conte, docente di Chimica all'Università di Palermo, è stato toccato il grave problema delle *fake news* e anche della necessità di mettere sull'avviso gli studenti che sono famelici e spesso acritici visitatori

della rete. Ci sono poi stati due interventi esterni; nel primo Silvia Borsacchi, ricercatrice dell'Istituto ICCOM del CNR di Pisa, ha illustrato il gioco PT Challenge (Sfida della Tavola Periodica) 2.0, la versione italiana aggiornata nel 2020 di un'iniziativa di successo lanciata da IUPAC nel 2019, anno internazionale di celebrazione della Tavola Periodica. È un gioco online pensato non solo per i chimici, ma anzi destinato al vasto pubblico di insegnanti, di studenti, e di tutti coloro che hanno interesse o curiosità per la chimica. Nel secondo intervento, invece, Veronica Cremonesi, responsabile Education di Federchimica, ha parlato delle tantissime ed efficacissime attività che Federchimica ha messo a punto per promuovere la chimica nelle scuole di vario ordine, dalle primarie alle secondarie di secondo grado. In quest'ambito è stato anche annunciato per l'anno scolastico 2021/2022 il Premio Nazionale Giovani Speciale Chimica e Sostenibilità finanziato in collaborazione con la Società Chimica Italiana e rivolto alle scuole primarie e a quelle secondarie di primo grado.

La Tavola Rotonda si è conclusa con una nota molto piacevole: l'incursione della biondissima e bellissima figlia della giornalista. La giovane età di questa partecipante, due anni e mezzo, e l'interesse che ha mostrato per quello che si stava dicendo fanno sicuramente ben sperare per la nostra disciplina.

Il terzo e ultimo pomeriggio è cominciato con la relazione di Eleonora Aquilini, vicepresidente della nostra Divisione, dal titolo “La cura di se stessi, degli altri e dell'ambiente nella scuola primaria” in cui è stato affrontato il delicato tema dell'educazione ambientale di cui a scuola pare nessuno voglia farsi carico. La relatrice è partita dalla considerazione che l'educazione ambientale ha lo scopo di mettere in relazione ognuno di noi con la Terra, con gli altri esseri umani, con tutti gli esseri viventi in una prospettiva di solidarietà e partecipazione responsabile che porta al riconoscimento e al rispetto di tutte le differenze. Ha, quindi, sottolineato che l'ambiente non deve essere percepito come altro da sé, ma come parte di un “noi” e che questo rapporto deve essere costruito anche a scuola, già a partire dalla scuola primaria. Ha, inoltre, aggiunto che le varie discipline, in particolare quelle scientifiche, dovrebbero tutte contribuire a questo modo di sentire l'unità uomo-ambiente che deve diventare parte integrante delle conoscenze e il focus della formazione.

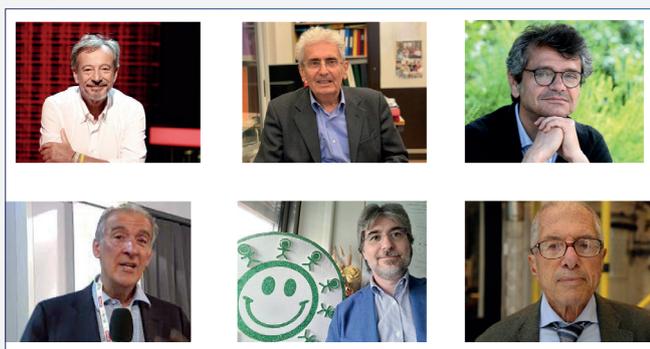


Fig. 2 - Tavola Rotonda “Sostenibilità a 360°”. Riga in alto da sinistra: Riccardo Iacona, Vincenzo Balzani e Andrea Segrè. Riga in basso da sinistra: Vittorio Maglia, Giovanni De Feo e Luigi Campanella

Ci sono poi state due comunicazioni brevi; una ha mostrato un'interessante iniziativa che dovrebbe portare alla costruzione di un archivio dei coloranti, mentre l'altra si è concentrata sull'importanza di potenziare il Piano Lauree Scientifiche e i Piani Orientamento e Tutorato; molti dei loro obiettivi, quali l'orientamento degli studenti, la formazione iniziale e in servizio dei docenti e il rafforzamento delle discipline STEM ai vari livelli scolastici, sono infatti presenti nel Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza e, quindi, sono da considerarsi strategici.

Quest'ultimo pomeriggio si è chiuso con la seconda Tavola Rotonda organizzata dalla Divisione il cui tema, perfettamente in linea con quello generale del congresso, è stato “Sostenibilità a 360 gradi” (Fig. 2); partendo dalla considerazione che la sostenibilità è legata ad una nuova idea di benessere, si è discusso sulla necessità di rivedere il concetto di sviluppo, che non deve guardare solo ai bisogni della generazione presente, deve abbattere le barriere sociali e deve salvaguardare il nostro pianeta. Lo sviluppo, per essere sostenibile, deve infatti coniugare e interconnettere tre ambiti: quello ambientale (uso responsabile delle risorse), quello economico (lavoro dignitoso a tutti) e quello sociale (giustizia ed uguaglianza). Si è anche dibattuto sulla necessità di compiere tre transizioni a loro volta interdipendenti, dai combustibili fossili alle energie rinnovabili, dall'economia lineare all'economia circolare e dal consumismo alla sobrietà, tre transizioni che richiedono di effettuare un grande salto culturale, ormai non più procrastinabile, data l'attuale crisi che stiamo vivendo. La Tavola Rotonda è stata coordinata da Riccardo Iacona, noto giornalista televisivo conduttore di “Presadiretta”,

che ha discusso i temi sopra esposti con i quattro relatori invitati. Vincenzo Balzani, professore emerito di Chimica all'Università di Bologna, ha parlato soprattutto di transizione energetica; Andrea Segrè, docente di Politica Agraria Internazionale e Comparata all'Università di Bologna, ha affrontato il problema dell'uso responsabile delle risorse e di economia circolare; Vittorio Maglia, dirigente di Federchimica, ha toccato il tema dello sviluppo sostenibile dell'industria chimica; infine, Giovanni De Feo, docente di Ingegneria Sanitaria-Ambientale presso l'Università di Salerno, ha dimostrato come sia necessario coniugare sostenibilità e didattica per formare cittadini responsabili. Alla Tavola Rotonda è anche intervenuto Luigi Campanella che, nella sua veste di rappresentante nazionale del Gruppo di Lavoro sull'Etica della Società Chimica Europea, ha illustrato compiti, obiettivi ed attività del gruppo.

### Una considerazione finale

Sicuramente per la Divisione di Didattica la partecipazione a questo Congresso SCI è stata molto soddisfacente perché, come detto inizialmente, è stato possibile preparare un programma abbastanza ricco e coinvolgere persone che, molto probabilmente, in presenza non si sarebbero potute avere. Anche dal punto di vista tecnico tutto è andato bene; l'unica pecca che si può sollevare, ad essere pignoli, è che chi seguiva le attività poteva intervenire solo attraverso la chat. Questo ha in qualche modo reso un po' asettica e impersonale la situazione, perché le domande venivano lette alla fine di ogni intervento dalla persona che coordinava la sessione, e forse ha anche ridotto il numero delle domande per la pigrizia di dover scrivere in chat.

### The Didactics Division at the SCI 2021 Congress

Contrary to all expectations, the online method used for the SCI 2021 Congress proved to be successful also for the Didactics Division, which was able to organize interesting sessions, difficult to achieve in presence, such as one plenary lecture, three invited lectures, and two Round Tables; furthermore, a truly unexpected number of “present at a distance” has been recorded.

# LA DIVISIONE DI ELETTROCHIMICA AL XXVII CONGRESSO SCI

Vito Di Noto, Riccardo Ruffo, Catia Arbizzani, Piercarlo Mustarelli

***La Divisione di Elettrochimica della SCI è stata ampiamente coinvolta nell'organizzazione del XXVII Congresso SCI, avendo contribuito alla selezione di prestigiosi invited speaker quale il Prof. Stanley Whittingham, premio Nobel per la Chimica 2019, e organizzato le sessioni divisionali, interdivisionali e un evento satellite. Nel corso del convegno sono stati consegnati i premi divisionali.***

Nel quadro dei lavori del XXVII Congresso della Società Chimica Italiana (SCI2021), che si è tenuto on-line dal 14 al 23 settembre 2021, la Divisione di Elettrochimica ha contribuito in maniera importante alla selezione e alla gestione degli invited speaker, all'organizzazione dei lavori divisionali, di quelli interdivisionali e di un evento satellite (dal titolo "La conversione e lo stoccaggio dell'energia chimica in energia elettrica, nella vita odierna e nella società futura") che è oggetto di uno specifico contributo, nelle pagine successive.

L'elettrochimica è una delle branche della chimica che negli ultimi anni si è sviluppata maggiormente, sia per il notevole interesse suscitato dallo studio dei suoi fondamenti, che per il suo ruolo centrale in numerosi campi di applicazione. Questi ultimi spaziano dalla sensoristica alla bioelettrochimica, dall'elettrochimica analitica ai dispositivi di conversione e stoccaggio elettrochimico di energia, che tanta parte hanno oggi e avranno in futuro nella moderna transizione energetica. Gli scenari sociali, economici e politici stanno rapidamente evolvendo, a livello globale, verso nuove forme di consapevolezza ambientale che sembrano irreversibilmente avviate a un miglior sfruttamento delle risorse del nostro pianeta, grazie all'utilizzo di schemi di economia circolare e alla progettazione di nuove tecnologie di produzione e accumulo dell'energia. In questo contesto l'elettrochimica, intrinsecamente multidisciplinare, gioca un ruolo centrale in un gran numero di settori che vanno dalle tecnologie di abbattimento di inquinanti ambientali al controllo di processo (sensoristica), dalla produzione di vettori energetici alla loro conversione in energia, dalle tecnologie industriali all'accumulo di energia, dalla cat-

tura di CO<sub>2</sub> alla progettazione di nuovi dispositivi per la conversione dell'energia solare. In questo fervido momento culturale, i rappresentanti della Divisione di Elettrochimica hanno lavorato per organizzare sessioni divisionali ed interdivisionali su tematiche di interesse globale che hanno riscosso un ottimo interesse presso la comunità scientifica, come provato dal numero di contributi ricevuti, da cui si sono selezionati 69 presentazioni orali, di cui 15 keynote e 19 poster, a testimonianza di una comunità vivace e impegnata. Le keynote sono state affidate su invito a ricercatori nazionali e internazionali di chiara fama. Il Direttivo ha promosso e incentivato la partecipazione di giovani ricercatori della Divisione erogando oltre 50 borse di studio per coprire le spese di iscrizione al convegno. I lavori del XXVII Congresso della SCI sono stati inaugurati dal contributo del Prof. Stanley Whittingham (Fig. 1), premio Nobel per la Chimica 2019 grazie ai suoi lavori fondamentali sull'intercalazione dello ione litio in materiali cristallini. Il Prof. Whittingham è stato selezionato e invitato a partecipare ai lavori dai

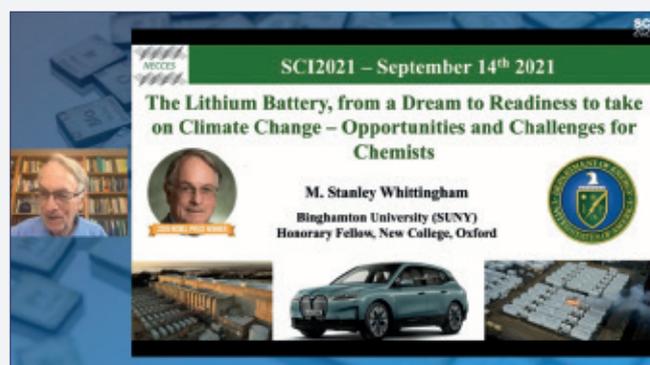


Fig. 1 - Un momento della presentazione di Stanley Whittingham, Premio Nobel per la Chimica 2019

delegati della Divisione di Elettrochimica, Prof. Vito di Noto (Università di Padova), che lo conosceva personalmente, e Prof. Riccardo Ruffo (Università di Milano-Bicocca) che lo ha incontrato ai convegni dell'Electrochemical Society nel 2019.

I lavori delle sessioni del XXVII Congresso della SCI gestite dalla Divisione di Elettrochimica si sono aperti la mattina del 15 settembre. In tale data hanno avuto luogo tre sessioni parallele. La sessione di Elettrochimica Generale, organizzata dalla Dr.ssa Sara Rebecani (Università di Bologna), è iniziata con un contributo keynote della Prof.ssa Patrizia Mussini (Università Statale di Milano), focalizzato su come correlare le informazioni ottenute da metodologie analitiche ottiche ed elettrochimiche. Dopo la pausa di metà mattina il pubblico ha avuto modo di ascoltare un contributo ad invito del Dr. Peter Fischer (Fraunhofer Institute for Chemical Technology, Germania) che ha discusso le diverse tecniche ed approcci necessari a rendere economicamente conveniente l'implementazione su vasta scala delle batterie aperte a flusso. La seconda sessione parallela, dedicata all'elettrocatalisi, è stata organizzata dal Prof. Christian Durante (Università di Padova) ed è stata inaugurata da un contributo keynote del Prof. Giovanni Valenti (Università di Bologna), che ha spiegato come utilizzare la chemiluminescenza prodotta mediante stimoli elettrochimici per sviluppare metodologie bioanalitiche ad elevate prestazioni. Nella stessa sessione si segnala anche il contributo keynote del Prof. Alessandro Minguzzi (Università Statale di Milano), volto a descrivere l'utilizzo della spettroscopia di assorbimento dei raggi X nello studio di (foto)elettrodi. Infine la terza sessione parallela, dedicata ai processi di corrosione e organizzata dal Prof. Onofrio Scialdone (Università di Palermo), ha avuto inizio con una presentazione ad invito del Prof. Marc Koper (Università di Leida, Paesi Bassi) volta a chiarire i più recenti progressi nello studio della reazione di elettroriduzione della  $\text{CO}_2$ . Dopo la pausa di metà mattina la Prof.ssa Monica Santamaria (Università di Palermo) ha presentato l'ultimo contributo keynote della sessione, teso a chiarire come opportuni trattamenti elettrochimici di superficie riescano a migliorare la resistenza alla corrosione delle leghe leggere.

La prima parte della mattinata del 16 settembre è stata dedicata alle **presentazioni dei vincitori dei premi divisionali** che, come ogni anno, vengono conferiti ai giovani ricercatori che si sono distinti nei loro lavori di laurea e di dottorato. La prima presenta-

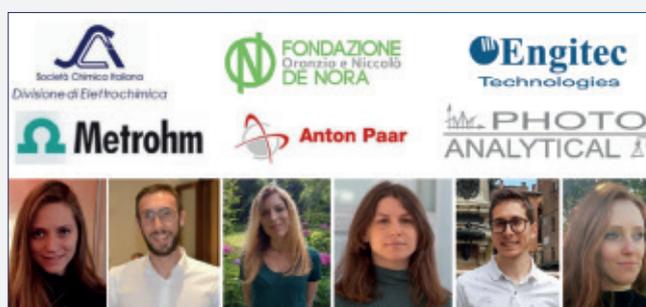


Fig. 2 - I giovani vincitori dei premi divisionali 2021. Da sinistra a destra: Laura Rotundo (Premio Engitec Technologies), Riccardo Brandiele (Premio Fondazione De Nora), Annalisa Polo (Premio Fondazione De Nora), Cecilia Wetzel (Premio Anton Paar), Lorenzo Ripani (Premio Photoanalytical), Sara Rebecani (Premio Metrohm)

zione, relativa al "Premio di Laurea Metrohm" è stata tenuta dalla Dr.ssa Sara Rebecani dell'Università Statale di Milano. I successivi contributi sono stati presentati dalla Dr.ssa Cecilia Wetzl (Università di Bologna, Università di Trieste e CIC BiomaGUNE, Spagna) e dal Dr. Lorenzo Ripani (Università di Bologna), relativi rispettivamente ai premi di laurea "Anton Paar" e "Photoanalytical". Dopo la pausa sono state, quindi, effettuate le tre presentazioni relative ai premi di dottorato (Fig. 2). Due premi sono stati conferiti dalla Fondazione Oronzio e Niccolò De Nora, rispettivamente al Dr. Riccardo Brandiele dell'Università di Padova ed alla Dr.ssa Annalisa Polo dell'Università Statale di Milano. Infine, il premio "Engitech Technologies" è stato assegnato alla Dr.ssa Laura Rotundo dell'Università di Torino. La Divisione, per mezzo del suo Direttivo, ringrazia gli sponsor che anche quest'anno hanno permesso l'erogazione dei premi.

L'assemblea della Divisione di Elettrochimica della SCI si è tenuta nella seconda metà della mattinata del 16 settembre. L'assemblea è stata aperta da un saluto del Presidente della Divisione, Prof. Vito Di Noto. Successivamente il Segretario/Tesoriere della Divisione, Prof. Christian Durante, ha presentato il bilancio della Divisione per l'anno appena conclusosi. Sono state, quindi, discusse una serie di iniziative e di attività condotte nell'ultimo anno, tra cui numerosi convegni e workshop organizzati/patrocinati dalla Divisione, e sono state presentate all'attenzione dei partecipanti e discusse alcune iniziative per l'anno venturo proposte dal Direttivo, tra le quali dei nuovi premi Divisionali sia per giovani ricercatori sia alla carriera. L'Assemblea è stata un importante momento di incontro e confronto, a cui ha partecipato una quota consistente dei Soci della Divisione (nella misura di circa 70 persone).



Nella mattinata del 17 settembre la Divisione di Elettrochimica ha organizzato 3 sessioni interdivisionali insieme ai colleghi delle divisioni di Chimica Fisica, di Chimica Analitica e di Chimica per le Tecnologie. La sessione interdivisionale con la Chimica Fisica è stata organizzata dalla Dr.ssa Maria Assunta Navarra (Università di Roma “La Sapienza”) ed ha avuto come keynote speaker selezionato dalla nostra divisione il Dr. Matteo Bonomo (Università di Roma “La Sapienza”); la presentazione del Dr. Bonomo è stata inerente a fotocatodi avanzati per celle solari tipo DSC. I contributi inseriti in questa sessione si sono soprattutto focalizzati nello studio dettagliato di fenomeni e processi alle interfacce elettrochimiche. La sessione comune ai colleghi di Analitica è stata organizzata dalla Prof.ssa Valentina Pifferi e dal Prof. Luigi Falciola, entrambi afferenti all’Università Statale di Milano; la keynote è stata affidata alla Prof.ssa Stefania Rapino (Università di Bologna). Quest’ultima ha discusso come la microscopia elettrochimica a scansione possa essere impiegata nello studio delle alterazioni metaboliche dovute al cancro. Le rimanenti presentazioni hanno invece coperto principalmente lo sviluppo di sensori elettrochimici avanzati. Infine, la sessione comune con la Divisione di Chimica per le Tecnologie è stata organizzata dal Prof. Claudio Gerbaldi (Politecnico di Torino), mentre la keynote è stata presentata dalla Prof.ssa Marta Feroci (Università di Roma “La Sapienza”) ed è stata focalizzata sullo sviluppo di elettroliti per elettrolizzatori. In questa sessione sono stati presentati principalmente dei contributi relativi a configurazioni elettrochimiche per dispositivi di conversione e stoccaggio elettrochimico di energia, con particolare riferimento a celle a combustibile e batterie secondarie.

Le attività congressuali gestite dalla Divisione di Elettrochimica hanno avuto termine la mattina del 21 settembre con un ricco programma scientifico organizzato in tre sessioni parallele, dedicate alla conversione e allo stoccaggio di energia e organizzate dal Prof. Riccardo Ruffo, dalla Prof.ssa Catia Arbizzani (Università di Bologna) e dal Prof. Vito di Noto. La prima sessione si è concentrata sugli aspetti elettrochimici associati al funzionamento degli elettrodi di dispositivi aperti di conversione dell’energia quali le celle a combustibile e le batterie metallo-aria. Nello specifico, il Prof. Piotr Zelenay (Laboratori Nazionali di Los Alamos, USA) ha aperto la sessione con una presentazione ad invito nella quale ha descritto

to i più recenti progressi nella realizzazione di celle a combustibile di tipo PEM nei cui catodi non viene utilizzato platino. Nella stessa sessione si evidenzia anche la presentazione ad invito del Prof. Lior Elbaz (Università Bar-Ilan, Israele) che ha discusso lo sviluppo di elettrocatalizzatori per la reazione di riduzione dell’ossigeno a base di aerogel. La seconda sessione parallela ha invece raccolto una serie di contributi inerenti le varie metodologie di studio e i differenti componenti delle batterie secondarie; di particolare rilievo sono state le presentazioni keynote della Dr.ssa Ketì Vezzù (Università di Padova), relativa allo sviluppo di catodi avanzati per batterie al litio, e del Prof. Michele Pavone (Università “Federico II” di Napoli), che ha avuto come argomento l’utilizzo della chimica quantistica come strumento per lo sviluppo di materiali funzionali eterogenei da impiegarsi in batterie secondarie avanzate. Anche la terza sessione parallela ha avuto come tema principale le batterie secondarie ed è stata aperta da una presentazione keynote della Dr.ssa Cristina Tealdi (Università di Pavia) relativa alla discussione dei fenomeni di intercalazione di ioni negli elettrodi delle batterie secondarie. Alla sessione ha partecipato anche il Prof. Teofilo Rojo (CIC energiGUNE, Spagna), che ha terminato il programma delle presentazioni ad invito con un contributo teso a discutere gli ultimi progressi recentemente conseguiti nello sviluppo delle batterie al sodio.

In conclusione il XXVII Congresso della SCI ha rappresentato un’occasione di grande rilevanza per condividere con i partecipanti numerosi contributi di altissimo livello scientifico, che hanno dato un quadro esauriente delle attività condotte a livello italiano e internazionale nelle varie e più moderne espressioni della ricerca in ambito elettrochimico.

### **The Division of Electrochemistry in the 27<sup>th</sup> SCI Congress**

The Electrochemistry Division of SCI was extensively involved in the organization of the 27<sup>th</sup> SCI Congress, having contributed to the selection of prestigious invited speakers, *e.g.*, Prof. Stanley Whittingham, Nobel Prize in Chemistry 2019, and organized the divisional, interdivisional sessions and a satellite event. During the conference, divisional prizes were also awarded.

# RUOLO DELLA SPETTROMETRIA DI MASSA NEGLI ANNI DELLA PANDEMIA

a cura del Consiglio Direttivo della Divisione di Spettrometria di Massa

***La Divisione di Spettrometria di Massa italiana ha organizzato tre sessioni tematiche su aspetti specifici dell'impiego della spettrometria di massa in tre campi: i) Omics ii) Food e iii) Environmental/Miscellaneous. Le tre sessioni hanno visto la partecipazione di diversi relatori internazionali e nazionali con contributi di elevato spessore scientifico (5 plenary e 3 keynote) oltre a 15 comunicazioni orali e a numerosi poster. Comunicazioni orali e poster hanno chiaramente evidenziato non solo le applicazioni della spettrometria di massa nella ricerca biomedica, alimentare e ambientale, ma anche fornito una visione di insieme della realtà italiana.***

La Divisione di Spettrometria di Massa ha dedicato la prima sessione ad applicazioni della spettrometria di massa in proteomica, metabolomica e lipidomica ed ha avuto l'onore di ospitare due plenary lecture su questo argomento. Nella prima plenary lecture intitolata "The Role of Mass Spectrometry in the - omics Era", la Dott.ssa Giuseppina Maccarone, direttrice della piattaforma di Proteomica del Max Planck Institute of Psychiatry (Munich, Germany), si è concentrata sul contributo significativo apportato dalla spettrometria di massa negli ultimi decenni sia in ambito clinico che preclinico. L'evoluzione della tecnica ha permesso di ottenere sempre più dati da matrici complesse, arrivando ad analizzare contemporaneamente centinaia di molecole, come metaboliti e peptidi. In ambito clinico psichiatrico, la Dott.ssa Maccarone spiega che tale capacità analitica ha permesso di meglio caratterizzare la relazione causale tra specifici meccanismi molecolari e patologie correlate allo stress, come depressione maggiore e disturbi d'ansia. Ad esempio, l'analisi della sequenza primaria di specifiche proteine, la loro localizzazione, l'interattoma e specifiche modificazioni post-traduzionali sono risultate fondamentali per comprendere le eziologie di tali disturbi. Nel contributo successivo, la Prof.ssa Daniela Cecconi (Università di Verona) ha presentato un lavoro dal titolo "Integrated lipidomics and proteomics reveal cardiolipin remodelling, upregulation of HADHA

and long chain fatty acids in pancreatic cancer stem cells". In questa presentazione ha dimostrato le potenzialità di combinare l'analisi proteomica e lipidomica mediante spettrometria di massa. Infatti, combinando il proteoma e il lipidoma, è stato possibile individuare una modulazione differente del metabolismo delle cardiolipine a livello mitocondriale. Subito dopo la Dott.ssa Pedretti dell'Università di Milano ha presentato un contributo dal titolo "Metabolomic approaches to investigate the role of the mitochondrial regulator Zc3h10 in adipocytes". La Dott.ssa Pedretti ha spiegato come la proteina Zinc Finger CCCH-type Containing 10, controlli il metabolismo energetico in preadipociti, determinando quindi il differenziamento adipocitario. Ancora una volta, la spettrometria di massa ha rappresentato un metodo centrale, grazie al quale è stato dimostrato come il silenziamento di questa proteina riduca i livelli di metaboliti appartenenti alla glicolisi e aumenti i livelli di acilcarnitine, suggerendo un ridotto metabolismo del glucosio e un aumentato catabolismo degli acidi grassi. Tali osservazioni sono state confermate attraverso una dettagliata analisi delle principali vie metaboliche attraverso la tecnica di "metabolic flux analysis" usando metaboliti marcati  $^{13}\text{C}$ . La sessione MAS si è riaperta dopo il coffee break con la seconda plenary lecture dal titolo "High-dimensional molecular phenomics in systems, synthetic, and chemical biology" presentata dal Prof. John

A. McLean, direttore del Dipartimento di Chimica della Vanderbilt University e direttore del “Center for Innovative Technologies” presso la stessa Università. Il Prof. McLean è uno dei massimi esponenti mondiali nello sviluppo della mobilità ionica accoppiata nella spettrometria di massa, e nella sua plenary lecture ha presentato questa tecnologia e ne ha discusso le potenzialità per applicazioni di metabolomica, lipidomica ed esposomica. In questa presentazione è emerso che l'utilizzo della mobilità ionica nella spettrometria di massa permette la risoluzione di molecole isobariche ed isomeriche, il tutto senza compromettere i tempi di analisi. Inoltre, ha evidenziato come la possibilità di determinare mediante la mobilità ionica una proprietà chimico-fisica delle molecole (la sua collision cross section) aumenti la percentuale di successo nell'identificazione di molecole non note, presenti in sistemi biologici, siano esse di natura esogena o endogena. Il Prof. McLean ha terminato il suo contributo sottolineando come i metodi computazionali e biostatistici siano di fondamentale importanza nelle scienze omiche, e che le nuove generazioni di chimici hanno la necessità di confrontarsi con questi approcci. Nell'intervento successivo dal titolo “Spatial proteomics to map tissue alterations during the progression of fibrosis in an IPF and Nintedanib-treated mouse model”, la Dott.ssa Isabella Piga dell'Università di Milano-Bicocca ha dimostrato le potenzialità della spettrometria di massa per ottenere immagini molecolari di un tessuto. Nello specifico, attraverso l'utilizzo della tecnologia MALDI-MS, ha dimostrato come sia possibile caratterizzare la composizione molecolare e spaziale di tessuti di polmone di una malattia nota come fibrosi polmonare idiopatica. In questo studio, ha dimostrato che il profilo proteomico quantitativo e spaziale del polmone cambia in seguito a terapia farmacologica con nintedanib. La sessione è proseguita con l'intervento del Dott. Federico Fanti dal titolo “Quantitative analysis of resolvins in biological matrices by means LLE- $\mu$ SPE-HPLC-MS/MS”. Nella presentazione, il Dott. Fanti ha presentato lo sviluppo di un metodo mediante cromatografia liquida accoppiato a spettrometria di massa tandem per la determinazione delle resolvine, una classe di lipidi coinvolti in diversi processi tra cui l'infiammazione. Il metodo combina, inoltre, due approcci di estrazione in serie, l'estrazione liquido-liquido e l'estrazione micro SPE, garantendo la quantificazio-

ne delle resolvine in tre matrici biologiche differenti come plasma, cellule ed essudati. L'ultimo contributo della sessione è stato quello della Dott.ssa Elettra Barberis dal titolo “A combined GCxGC-MS and GC-MS Approach to discovery and validate new potential biomarkers for prostate cancer diagnosis”. Questa presentazione ha dimostrato che la ricerca di biomarcatori per il cancro alla prostata beneficia dell'alto potere risolutivo ottenuto accoppiando due separazioni cromatografiche in fase gassosa (GCxGC) consecutive con la spettrometria di massa. Grazie ad un aumento sia della risoluzione che della sensibilità analitica, l'analisi mediante GCxGC-MS fornisce una più ampia copertura del metaboloma, aumentando la possibilità di identificare nuovi potenziali biomarcatori per la stratificazione di pazienti affetti da cancro alla prostata.

La sessione “Food” si è aperta con una plenary lecture intitolata “Mass spectrometry in coffee science: from bean to drink to human” e presentata dal Prof. Nikolai Kuhnert della Jacobs University di Brema. Il Prof. Kuhnert ha offerto una panoramica molto apprezzata focalizzata sui recenti sviluppi nell'identificazione di numerosi composti chimici presenti nel caffè, sottolineando il ruolo fondamentale della spettrometria di massa. Gli acidi clorogenici, ad esempio, polifenoli antiossidanti caratterizzati da positive attività biologiche, sono stati oggetto di particolare attenzione. La presentazione ha messo in luce la complessità della molteplicità delle strutture chimiche degli acidi clorogenici e della loro reattività, finora ancora pressoché sconosciuta e inesplorata. A seguire, la presentazione della Dott.ssa Alessandra Tata dell'Istituto Zooprofilattico delle Venezie, dal titolo “Non-targeted authentication of food products: the synergic combination of ambient mass spectrometry, data fusion and machine learning” ha fornito una descrizione dettagliata degli elementi essenziali per lo sviluppo e la validazione di metodi non-targeted per la rivelazione di adulteranti alimentari. Tra i principali problemi connessi all'autenticazione alimentare, è stata sottolineata la necessità di avere set di riferimento eterogenei e tecniche di controllo per la verifica dei risultati. Nella comunicazione “Influence of mixed starter cultures of *Hanseniaspora osmophila* and *Saccharomyces cerevisiae* on wine flavor profile explored through HS-SPME/GC-MS”, della Dott.ssa Maria Assunta Acquavia dell'Università degli Studi della Basilica-

ta, è stato descritto un lavoro atto alla valutazione dell'influenza di colture starter miste di lieviti sul profilo aromatico del vino. Particolare attenzione è stata rivolta all'ottimizzazione dei parametri che influenzano l'efficienza della microestrazione in fase solida. L'impiego di specie wild di lieviti si è dimostrato un fattore chiave ai fini dell'aroma e della differenziazione dei prodotti enologici esaminati. La sessione MAS 02 si è riaperta dopo il coffee break con una keynote lecture tenuta dalla Dott.ssa Linda Monaci, dell'Istituto di Scienza delle Produzioni Alimentari (ISPA-CNR), intitolata "Future challenges in MS based technologies applied to the safety of foods". La panoramica si è incentrata sull'applicazione della spettrometria di massa alla sicurezza degli alimenti. I limiti e i vantaggi della tecnica sono stati descritti insieme ad alcuni casi di studio su rivelazione e quantificazione di contaminanti vietati in prodotti alimentari. La necessità di armonizzare i metodi basati sulla spettrometria di massa e le possibili strade da sviluppare in tale direzione, sono stati oggetto di una dinamica discussione. La Dott.ssa Rosalia Zianini (Istituto Zooprofilattico Sperimentale della Puglia e Basilicata) ha presentato lo studio "Lipidomic approach to evaluate the effect of X-ray irradiation treatment on the lipid profile of Camembert cheese". È stato valutato l'effetto dell'irradiazione dei raggi X sulla composizione lipidica del formaggio Camembert attuato per inattivare e distruggere i patogeni ed i microrganismi che inducono il deterioramento del prodotto. Lo studio della lipidomica ha evidenziato nei campioni irradiati un aumento di monoacilgliceroli e fosfatidiletanoli ed una diminuzione di triacilgliceroli e diacilgliceroli. Successivamente la Dott.ssa Fabiola De Marchi del Centro di Viticoltura & Enologia (CREA-VE), ha presentato un interessante lavoro dal titolo "High-resolution mass spectrometry approaches finalized to identification of new glycoside compounds in grape", in cui ha illustrato la possibilità di identificare le sostanze naturali di natura flavonoidica (flavanoli e flavanoni) nelle uve e loro prodotti grazie allo sviluppo di un database specifico che va ad implementare un database precedentemente sviluppato dallo stesso gruppo di ricerca. Le potenzialità di un approccio UHPLC/QTOF combinato con targeted data analysis e l'utilizzo di uno specifico DB sono state particolarmente apprezzate in quanto spaziano dall'analisi dei vini alle più vaste applicazioni per studi di metabolomica vegetale. Il

Dr. Ciro Cannavacciuolo dell'Università degli Studi di Salerno ha presentato l'intervento "Analysis by high-resolution mass spectrometry of polyphenolic alkaloids fraction from *Portulaca oleracea*". Nello studio sono stati caratterizzati i profili di polifenoli, alcaloidi e lipidi polari degli estratti di *P. oleracea* selvatica. La caratterizzazione ha consentito l'identificazione di alcuni alcaloidi polifenolici. Infine, la presentazione della Dr.ssa Lucia Bartella dell'Università della Calabria, dal titolo "Paper Spray tandem mass spectrometry: an innovative approach to assess flavonoid content in citrus drinks" ha descritto una metodologia per quantificare i flavonoidi più abbondanti nelle bevande a base di agrumi. La metodologia si basa sull'uso della paper-spray accoppiata alla spettrometria di massa tandem in modalità MRM. La metodica permette di discriminare isomeri e di essere validata per applicazioni quantitative. L'intervento di apertura della sessione "Miscellaneous" è stato tenuto dalla Prof.ssa Encarnación Moyano dell'Università di Barcellona dal titolo "Mass spectrometry for the environmental analysis of halogenated organic pollutants". La Prof.ssa Moyano ha presentato un'ampia descrizione dei possibili contaminanti ambientali alogenati (OA, PCB, Diossine, PFOA, PFOS ecc.) e le varie tecniche che utilizzano la spettrometria di massa per identificarli, tenendo conto dei limiti di quantificazione molto bassi imposti dalla normativa EU. La Prof.ssa Sara Bogianni dell'Università di Padova ha sottolineato nuovamente, con la sua relazione dal titolo "Mass spectrometry for the monitoring and protection of the environment", la necessità per i laboratori di raggiungere limiti di quantificazione sempre più bassi nel monitoraggio dei contaminanti ambientali, sia per i metodi "target" che per quelli "un-target", anche in considerazione della vigente normativa europea e nazionale. La prima parte della sessione si è conclusa con la relazione della Dott.ssa Carolina Barola dell'IZS Umbria e Marche, che ha presentato la relazione "Temporal trend of per- and polyfluoroalkyl substances in air samples collected at the rural site of Monte Martano (Central Italy)". La seconda parte della sessione è iniziata con l'interessantissimo intervento del Prof. Antony Memboeuf dell'Università della Bretagna Occidentale, che ha presentato una relazione dal titolo: "How can energetics in CID MS/MS help the analytical chemists?".

A questo sono seguiti gli interventi: “Fabric phase sorptive membrane array: a novel approach for non-invasive in vivo sampling” della Dott.ssa Angela Tartaglia; “An interplay between FT-ICR MS and LC-LTQ MS/MS for metabolic profiling of peperoni di Senise PGI Bell Peppers” della Dott.ssa Raffaella Pascale; “Volatile organic compounds in Gorgonzola cheese and their relationship with sensory descriptors and consumers’ liking” del Prof. Eugenio Aprea. La sessione si è conclusa con la relazione “New synthetic opioids: development of analytical methods for their characterization and determination by means of HPLC-HRMS/MS” presentata dalla Dott.ssa Flaminia Vincenti, che ha presentato uno studio per la determinazione di nuovi oppiacei sintetici in diverse matrici biologiche utilizzando la spettrometria di massa e le moderne metodologie di miniaturizzazione per la preparazione dei campioni.

### **Role of Mass Spectrometry in the Years of the Pandemia**

The Italian Mass Spectrometry Division organized three thematic sessions on specific aspects of the use of mass spectrometry technique in three main fields: i) Omics ii) Food and iii) Environmental/Miscellaneous. Various international and national speakers contributed with high scientific communications (5 plenaries and 3 keynotes) as well as 15 oral communications and numerous posters. Oral communications and posters clearly highlighted not only the role of mass spectrometry in biomedical, nutritional and environmental research and practical application but also provided an overview of the actual Italian situation.

---

## **LA CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE AL CONGRESSO SCI2021**

Michele Ceotto, Claudio Greco, Michele Pavone, Maria Cristina Menziani

***La Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI si è riunita in tre sessioni divisionali e una condivisa con la divisione di Chimica Fisica. Gli interventi, su invito o per l'invio di un abstract o per il conferimento dei premi Scrocco, Del Re e Roetti, dimostrano un'attività di ricerca vivace e variegata in linea con gli standard internazionali.***

**L**avori della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana nel contesto del congresso SCI2021 hanno avuto luogo durante tre sessioni divisionali e una sessione condivisa con la Divisione di Chimica Fisica. La grande maggioranza dei contributi inviati all'attenzione del Consiglio Direttivo della DCTC e dei Referenti Divisionali per SCI2021 (proff. Michele Ceotto e Claudio Greco) ha dato luogo a presentazioni ora-

li, mentre un numero limitato di contributi è stato oggetto di presentazione nelle sessioni poster del congresso. Le sessioni divisionali e congiunta sono state arricchite da contributi orali su invito - in formato di keynote talk - e da contributi legati al conferimento di premi per l'attività scientifica, come di seguito dettagliato.

La prima sessione divisionale ha avuto luogo nel corso del pomeriggio del 15 settembre; il Presiden-

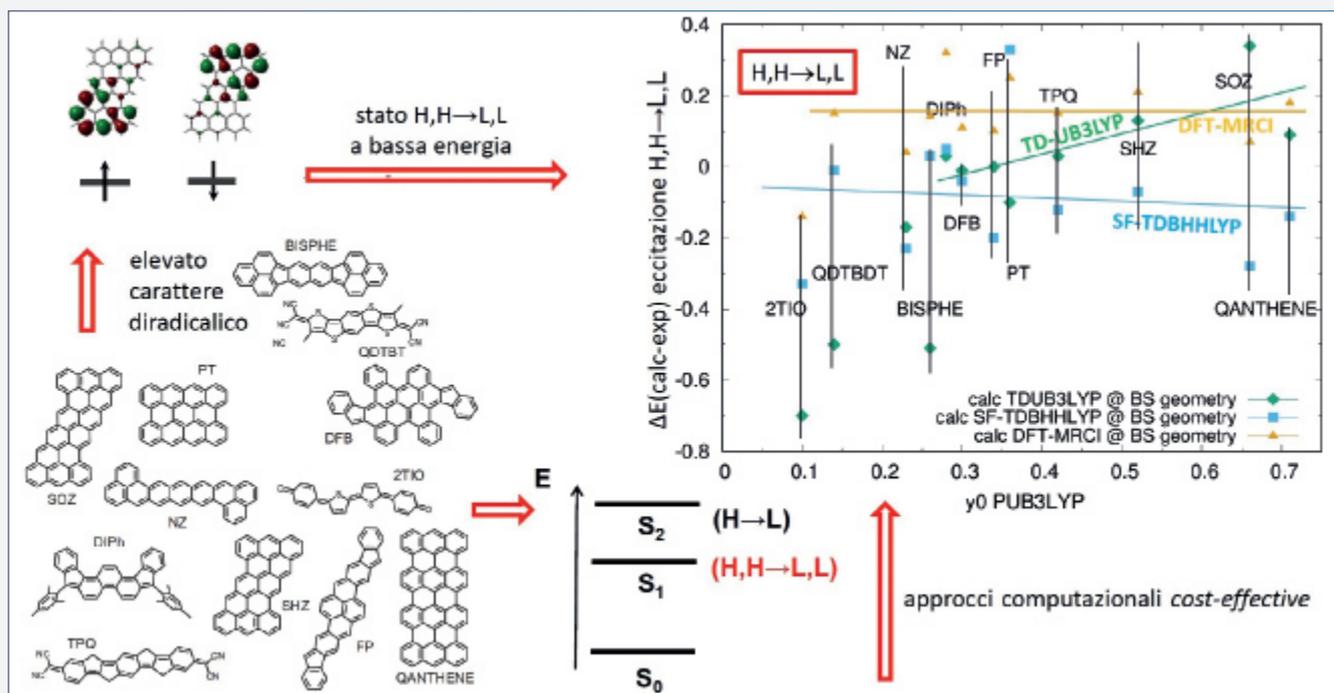


Fig. 1 - Negli ultimi anni sono state sintetizzate numerose molecole  $\pi$ -conjugate stabili con stato fondamentale di singoletto caratterizzato da un marcato carattere diradicalico che conferisce proprietà elettroniche, magnetiche e ottiche uniche a questi sistemi. In questo contesto gli studi computazionali condotti presso i laboratori della prof.ssa Negri hanno messo in luce una proprietà distintiva, che influenza la fotofisica dei diradicali coniugati: la presenza di uno stato elettronico eccitato a bassa energia dominato dalla doppia eccitazione ( $H,H \rightarrow L,L$ ), in analogia con quanto noto per i polieni

te della DCTC - prof.ssa Maria Cristina Menziani - ha aperto i lavori, affiancata dalla dott.ssa Gloria Mazzone quale co-chair. Il primo talk, su invito, è stato tenuto dalla proff.ssa Emilia Sicilia (Università della Calabria), che ha descritto i risultati da lei recentemente ottenuti nell'ambito dello studio del meccanismo di azione di farmaci per la cura del cancro. In particolare, i risultati illustrati dimostrano come approcci di tipo quantistico possano rappresentare una risorsa cruciale nella caratterizzazione preclinica del meccanismo di azione sia di farmaci antitumorali "classici" (ad es. analoghi del cisplatino) sia di *lead compound* altamente innovativi. A seguire, ha avuto luogo il contributo orale della dott.ssa Greta Donati (Università di Napoli Federico II), premio Scrocco 2021, che, tra gli altri recenti risultati, ha descritto lo sviluppo e l'applicazione di una tecnica teorico-computazionale basata su trasformata wavelet che consente di investigare dettagliatamente lo shift di bande vibrazionali e fenomeni di accoppiamento anarmonico; la versatilità dell'approccio proposto ha consentito di studiare nel dettaglio le proprietà fotofisiche di tipo Raman di sistemi complessi quali la Green Fluorescent Protein, con ottimi riscontri in termini

di confronto con dati sperimentali spettroscopici con impulso al femtosecondo. Ha poi avuto luogo l'intervento del prof. Alessandro Erba (Università di Torino), premio Roetti 2021. Dopo una coinvolgente introduzione centrata sulla figura di Carla Roetti, il prof. Erba si è concentrato sui recenti risultati ottenuti presso i laboratori dell'Università di Torino, nell'ambito degli approcci relativistici alla teoria del funzionale della densità; in particolare, è stato approfondito il tema del trattamento dello scambio esatto di Fock nel contesto della *spin current density functional theory* (SCDFT); tali risultati potranno avere impatto, ad esempio, nel contesto della descrizione teorica di materiali esposti a campi magnetici esterni. Gli altri contributi orali hanno spaziato dalla caratterizzazione di materiali e sistemi molecolari per applicazioni tecnologiche e mediche attraverso approcci sia classici sia quantistici, allo studio teorico di fenomeni di electron transfer e di separazione di gas mediante membrane.

Per quanto riguarda la seconda sessione divisionale del 17 settembre (chair: proff. Giovanna Fronzoni e Claudio Greco), nella prima metà hanno avuto luogo nove talk centrati su applicazioni della chimica computazionale allo studio di sistemi di interesse

biologico (principalmente proteine anche con attività enzimatica e molecole bioattive) e di fenomeni di solubilità e di trasporto di carica. Successivamente, ha avuto luogo il talk su invito della prof.ssa Fabrizia Negri (Università di Bologna). La prof.ssa Negri ha illustrato i recenti risultati delle ricerche condotte nei laboratori da lei diretti, in materia di relazioni struttura-proprietà in semiconduttori organici (Fig. 1); in tale contesto, una delle principali tematiche affrontate ha riguardato lo studio computazionale della relazione tra interazioni intermolecolari, proprietà intramolecolari e il trasporto di carica in semiconduttori organici di nuova generazione. Tali ricerche potranno avere grande rilevanza ai fini del miglioramento delle performance della tipologia di materiali che è stata oggetto di studio. A seguire, hanno avuto luogo le presentazioni dei dottori Giovanni Di Liberto (Università di Milano - Bicocca) ed Eduardo Schiavo (Max Planck Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr), a cui è stato conferito il premio Del Re sui bandi dell'ultimo biennio, quale riconoscimento dell'eccellenza delle loro tesi di dottorato di ricerca svolte rispettivamente presso l'Università Statale di Milano e l'Università Federico II di Napoli. Il dott. Di Liberto ha affrontato la tematica relativa ai recenti risultati da lui ottenuti nell'utilizzo di approcci di chimica teorica volti al design di eterogiunzioni di semiconduttori per applicazioni fotocatalitiche, mentre il dott. Schiavo ha relazionato sui recenti risultati delle sue ricerche nell'ambito dello studio *ab initio* di materiali eterogenei per applicazioni di tipo foto-elettrochimico.

L'ultima sessione divisionale (21 settembre, chair: proff. Michele Ceotto e Isabella Daidone) si è aperta con il talk su invito del prof. Mauro Stener (Università di Trieste); quest'ultimo ha centrato il suo discorso su uno studio di tipo DFT dipendente dal tempo (TDDFT) sul monoanione del cluster  $\text{Ag}_{24}\text{Au}(\text{DMBT})_{18}$ , essendo DMBT il legante 2,4-dimetilbenzotiolato (Fig. 2). Tra i vari aspetti altamente innovativi, tale studio ha consentito al prof. Stener e collaboratori di approfondire la relazione tra i risultati del calcolo delle proprietà ottiche di questo complesso prototipico e la scelta del funzionale di

scambio e correlazione. Il successivo intervento è stato tenuto dal dott. Lorenzo Cupellini (Università di Pisa), insignito del premio Scrocco 2020. Il dott. Cupellini ha illustrato i risultati di uno studio teorico multiscala riguardante il quenching della fluorescenza della clorofilla in complessi *light-harvesting* delle piante, fenomeno di cruciale importanza per la fotoprotezione in tali organismi autotrofi; in questo studio, è stato dimostrato che il processo di quenching può essere finemente regolato dagli organismi fotosintetici, attraverso specifici fenomeni di riarrangiamento conformazionale a carico delle proteine coinvolte. La seconda presentazione della sessione legata al conferimento di un premio ha visto come relatore il prof. Nicola Tassinato (Scuola Normale Superiore), insignito della medaglia Roetti 2020. Il prof. Tassinato ha relazionato sulle strategie computazionali sviluppate nei laboratori della Scuola Normale per soddisfare i requisiti di accuratezza necessari per lo studio teorico delle proprietà strutturali, spettroscopiche e termochimiche di specie che giocano un ruolo di cruciale importanza nella chimica dell'atmosfera; tra i sistemi oggetto di tali studi, vi sono ad esempio le idrofluoroolefine, protagoniste di un crescente uso industriale quali refrigeranti in sostituzione dei clorofluorocarburi,

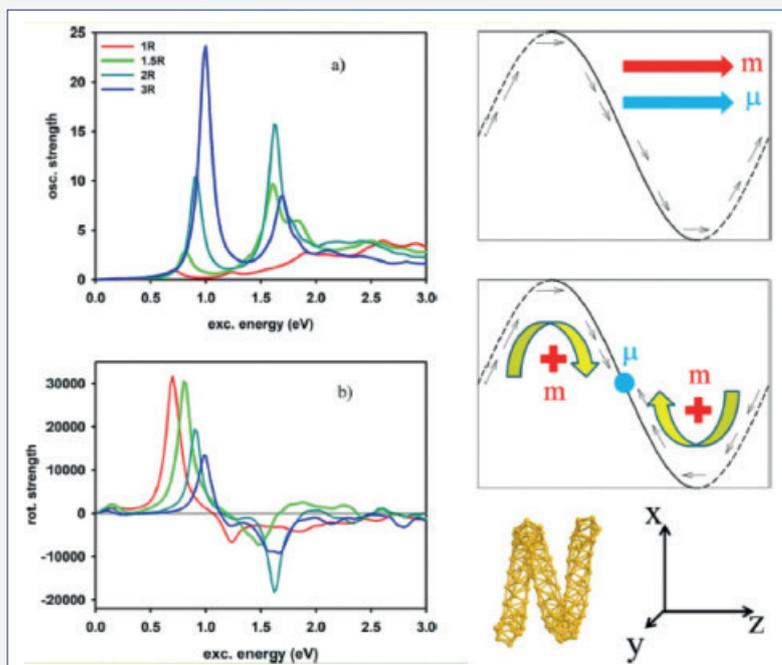


Fig. 2 - La figura mostra le applicazioni dei metodi della chimica computazionale a cluster metallici chirali e conseguente calcolo del dicroismo circolare elettronico, con particolare riferimento ai recenti risultati ottenuti in tale campo di ricerca nei laboratori del prof. Stener

ben noti per il loro devastante impatto ambientale. Le altre presentazioni dell'ultima sessione divisionale del congresso SCI2021 hanno riguardato svariate tematiche di frontiera, dagli sviluppi metodologici in ambito semiclassico e nel contesto delle simulazioni di spettri vibrazionali, fino a studi di dinamica molecolare *ab initio* anche in sistemi fuori dall'equilibrio e di proprietà dinamiche di materiali vetrosi, passando per studi di struttura elettronica di sistemi di interesse applicativo. L'ultima nota riguardante i contributi di pertinenza divisionale DCTC riguarda i poster, presentati da giovani ricercatori su varie tematiche, quali ad esempio l'applicazione di approcci innovativi di spettroscopia computazionale e lo studio di fenomeni reattivi e dinamici di interesse applicativo-tecnologico.

Riguardo al programma congiunto con la Divisione di Chimica Fisica, i lavori si sono svolti in due sessioni congiunte con i proff. Michele Pavone e Francesco Zerbetto come chairs: sono state presentate due keynote lecture dal Prof. George E. Froudakis (Università di Creta) e dal prof. Alfonso Pedone (Università di Modena e Reggio Emilia), entrambi i contributi hanno avuto come oggetto principale l'applicazione di Artificial Intelligence e Machine Learning per lo studio di materiali nanostrutturali (Froudakis) e per lo studio atomistico di sistemi vetrosi (Pedone, Fig. 3); gli altri contributi orali alla sessione congiunta hanno riguardato sia aspetti relativi alla simulazione di sistemi complessi, sia interessanti sviluppi teorici per descrivere aspetti elettronici e dinamici di processi chimico-fisici relativi alla spettroscopia e alla reattività.

Complessivamente, le presentazioni scientifiche proposte dai soci della DCTC sono risultate di elevato livello qualitativo e hanno riguardato prevalentemente tematiche di rilevanza interdisciplinare, pur senza trascurare questioni più prettamente relative allo sviluppo teorico e all'implementazione

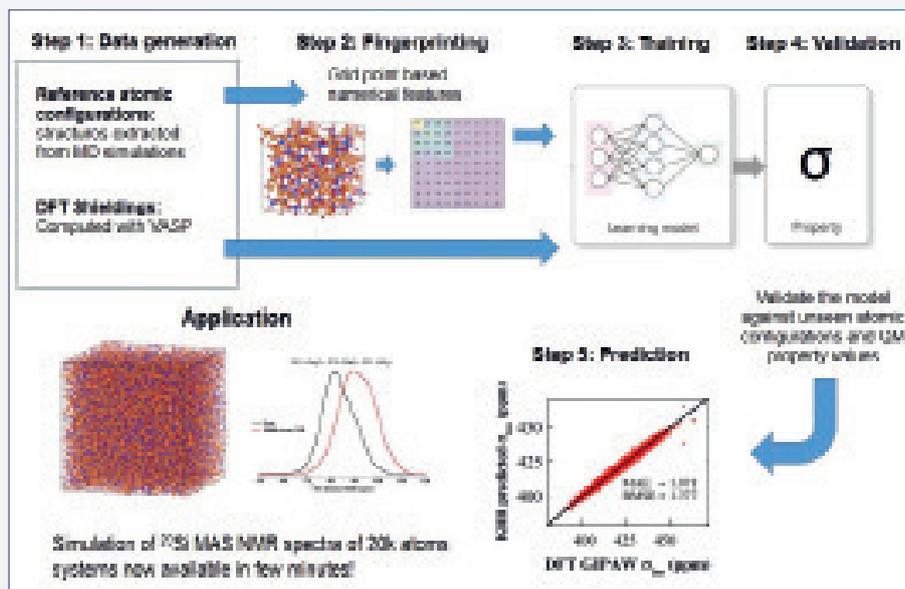


Fig. 3 - La figura mostra il diagramma di flusso della procedura di apprendimento supervisionato utilizzato per lo sviluppo di modelli di Machine Learning per la predizione delle costanti di schermo NMR per nuclei di silicio in vetri silicatici. Il primo step prevede la generazione di un set di dati di allenamento costituito da configurazioni atomiche di vetri di interesse e le costanti di schermo calcolate a livello di DFT per ogni nucleo presente nel sistema. L'intorno chimico di ogni nucleo è descritto da descrittori strutturali (per esempio, funzioni di simmetria) invarianti rispetto a operazioni di simmetria e permutazione degli atomi. Nei laboratori del prof. Pedone, algoritmi basati sulle reti neurali o Kernel Ridge Regressions sono allenati e validati utilizzando centinaia di migliaia di coppie descrittore-costante di schermo

di nuove metodologie computazionali. Il tenore delle discussioni suscitate dagli interventi orali è risultato paragonabile a quello dei passati congressi svoltisi in presenza, anche se è ovvio l'auspicio e la speranza che i prossimi eventi congressuali, in presenza, possano risultare ancora più coinvolgenti e forieri di fruttuose discussioni di cui possano essere partecipi soprattutto i soci più giovani, ovvero coloro che non hanno avuto occasione di vivere l'esperienza di un congresso nazionale SCI organizzato secondo modalità più classiche.

### The Computational and Theoretical Chemistry Division at the National SCI2021 Meeting

The Italian Chemistry Society Theoretical and Computational Division meeting has been articulated in four sessions, one of which shared with the Physical Chemistry Division. The talks, either invited or by abstract submission or after the Scrocco, Del Re and Roetti prizes, showed a lively and variegated community that meets the international standards.

# DIVISIONE DI CHIMICA PER LE TECNOLOGIE

Alessandro Sacchetti

***Sono riassunti i lavori della Divisione al XXVII congresso della SCI, che hanno compreso un totale di 59 relazioni orali e 28 poster. Sono stati trattati svariati argomenti, quali materiali e nanomateriali, biomateriali per applicazioni biomediche, bonifica ambientale e valorizzazione di biomasse, sensoristica per analisi ambientale e medica, catalisi, tecniche computazionali, a testimonianza della vocazione multidisciplinare tipica della Divisione.***

**D**urante il XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, svoltosi interamente on-line dal 14 al 23 settembre, si sono tenuti i lavori della neonata Divisione di Chimica per le Tecnologie. Questo appuntamento, il primo dopo la pausa dovuta all'emergenza pandemica, ha rappresentato il primo evento ufficiale per questa Divisione, nata lo scorso anno. All'interno dell'intenso programma del congresso, la Divisione ha potuto organizzare i suoi lavori in quattro sessioni più una sessione interdivisionale organizzata in collaborazione con la Divisione di Elettrochimica. La selezione delle comunicazioni orali e poster al congresso è stata seguita dall'intero direttivo della Divisione, mentre l'organizzazione delle sessioni e dei programmi è stata gestita dai professori Fabio Ganazzoli e Alessandro Sacchetti, entrambi del Politecnico di Milano, sotto la supervisione del presidente professor Salvatore Failla dell'Università di Catania.

Complessivamente sono stati raccolti ottantasette contributi, suddivisi in cinquantanove presentazioni orali e ventotto presentazioni poster, un ottimo risultato per il primo evento comunitario della Divisione. A queste, si sono aggiunte tre invited lectures e quattro keynote tenute, su invito, da relatori prestigiosi selezionati dal comitato scientifico, rappresentato dal direttivo divisionale.

Particolarmente soddisfacente è stata l'elevata partecipazione di giovani, dottorandi e assegnisti, che hanno potuto presentare i risultati delle loro ricerche ai membri della Divisione. Per favorirne la partecipazione, la Divisione ha messo a disposizione cinque borse di studio per coprire il costo di iscrizione al congresso. Tra le numerose domande pervenute

sono state selezionate dal comitato scientifico, sulla base dei curricula presentati, le seguenti persone: Martina Bortolami, assegnista presso l'Università La Sapienza di Roma; Ambra Maria Fiore, assegnista del Politecnico di Bari; Arianna Rossetti, assegnista al Politecnico di Milano; Martina Sanadar, dottoranda dell'Università di Udine; Virginia Venezia, dottoranda dell'Università di Napoli Federico II. Tutte le vincitrici di borsa hanno poi avuto la possibilità di presentare i loro lavori in una comunicazione orale. Le tematiche trattate durante il congresso sono state molteplici, e sia le invited lectures che le keynote hanno ben rappresentato la varietà degli argomenti esposti. Le invited lectures sono state tenute da Alberto Rainer, Larisa Lvova e Alessandro Gori (Fig. 1). Nella sua presentazione dal titolo "Nanogels as smart drug delivery systems", il professor Rainer, del Campus Bio-Medico di Roma, ha illustrato le potenzialità applicative della nano-incapsulazione di farmaci quale strumento efficace per il rilascio mirato di farmaci in un'ampia gamma di trattamenti terapeutici. In questo scenario, i nanogel (NG) occupano un ruolo importante e sono stati applicati dal gruppo di ricerca per la terapia del cancro. Il rilascio mira-



Fig. 1 - Invited Lecture speakers: prof. Alberto Rainer, prof.ssa Larisa Lvova, dott. Alessandro Gori

to di farmaci antitumorali è stato effettuato mediante l'uso di NG opportunamente modificati per essere selettivi verso i marcatori di cellule tumorali EGF-R e CD44. Inoltre, è stato messo a punto un sistema originale di sintesi di NG in flusso in modo da permettere la scalabilità del processo di preparazione. Nel corso della sessione interdivisionale

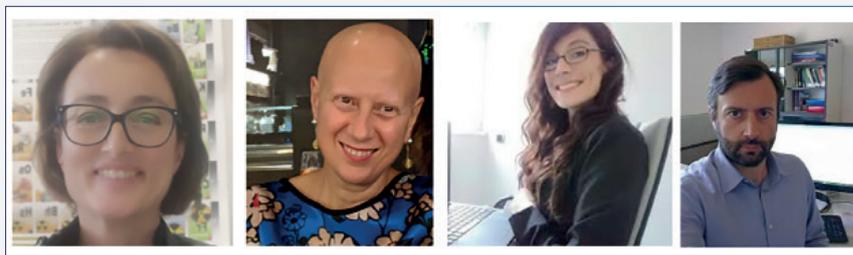


Fig. 2 - Keynote speakers: da sinistra; prof. Claudia Espro, dott.ssa Monica Fabrizio, dott.ssa Serena De Santis, prof. Andrea Melchior

con la Divisione di Elettrochimica, la professoressa Larisa Lvova dell'Università di Roma - Tor Vergata, ha relazionato sull'applicazione di sensori chimici potenziometrici, con uno sguardo alle applicazioni per l'analisi ambientale ("Recent advances in potentiometric sensors for environmental purposes: from single ion-selective electrodes to multisensor analysis"). I sensori potenziometrici polimerici a membrana sono di particolare interesse per la possibilità di regolare le proprietà di rilevamento di tali dispositivi attraverso l'accurata selezione dei componenti attivi della membrana. In questo contesto, gli ISE (ion-selective electrodes) presentano molti vantaggi rispetto a sistemi classici per il rilevamento di molte sostanze. Infine, nell'ultima invited lecture presentata, è intervenuto il dott. Alessandro Gori appartenente all'Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche "Giulio Natta" del CNR con una relazione dal titolo "Liquid biopsy at the crossroads of chemistry and technology: the extracellular vesicles case study". Le vescicole extracellulari (EV) sono particelle biologiche membranose di dimensioni micro e nano rilasciate dalle cellule e svolgono un ruolo importante nella comunicazione intercellulare e recentemente stanno suscitando grande interesse come possibili strumenti teranostici di prossima generazione. In questa relazione è stata presentata una piattaforma di microarray progettata per l'isolamento e l'analisi di EV. La piattaforma permette il conteggio e dimensionamento di EV e la loro fenotipizzazione, attraverso l'uso di opportuni materiali polimerici e di peptidi quali esche molecolari per interagire con le EV.

Nella prima delle quattro keynote (Fig. 2), la prof.ssa Claudia Espro dell'Università di Messina, ha relazionato sulla carbonizzazione idrotermica (HTC), un processo di conversione termochimica che rappresenta una promettente tecnica di trattamento per rifiuti da biomasse lignocellulosiche umide. In queste condizioni la biomassa viene disidratata e trasformata in prodot-

ti solidi, liquidi e non condensabili. In questo caso, la HTC è stata studiata come approccio sostenibile per la valorizzazione degli scarti della lavorazione industriale degli agrumi, permettendo di ottenere prodotti chimici di potenziale interesse, ad esempio, come materie prime per la sintesi di sostanze chimiche più complesse e biocarburanti liquidi. La dott.ssa Monica Fabrizio, dell'istituto ICMATE, al CNR di Padova, ha illustrato due esempi di applicazione di materiali per applicazioni tecnologiche nel campo dell'energia. Nel primo, si sono discusse la sintesi e la messa a punto di diversi materiali per la separazione selettiva dell'idrogeno mediante membrane. La separazione dell'idrogeno avviene selettivamente grazie alle proprietà chimico-fisiche dei materiali attivi, ottenendo così H<sub>2</sub> utilizzabile come vettore energetico o reagente chimico. Nel secondo esempio si è affrontata la fabbricazione di rivestimenti ceramici e metallici per la protezione di grandi pale eoliche per le applicazioni offshore. In questo caso risulta importante la protezione delle pale dall'erosione, che può limitare drasticamente la potenza della turbina. La tecnica della microspettroscopia FT-IR applicata allo studio di tessuti biologici, è stato oggetto della keynote tenuta dalla dott.ssa Serena De Santis, dell'Università di Roma Tre. Abbinando l'analisi multivariata con i dati da micro-FTIR, è possibile esaminare la struttura e la conformazione di lipidi, proteine e acidi nucleici al fine di riconoscere condizioni patologiche, identificare biomarcatori per la classificazione dei tessuti e classificare le malattie: tutto ciò rende questa tecnica uno strumento promettente per la diagnostica e la valutazione della funzionalità dei tessuti. In questo studio, questa tecnica è stata applicata con successo all'identificazione di due delle neoplasie più diagnosticate nell'uomo, il carcinoma del colon-retto (CRT) e il carcinoma papillare della tiroide (PTC). Infine, il professor Andrea Melchior dell'Università di Udine ha esposto i risultati dei suoi studi di dinamica molecolare per l'adsorbimento del farmaco diclofenac su nanomateriali

carboniosi. I composti farmaceutici possono ritrovarsi come contaminanti presenti nelle acque anche a concentrazioni relativamente elevate. Per il trattamento delle acque, i materiali adsorbenti a base di carbonio sono molto interessanti per via della loro elevata affinità per i farmaci, dell'elevata capacità di carico e della capacità di essere rigenerati. La comprensione dei meccanismi molecolari alla base dell'adsorbimento di tali composti ha quindi stimolato numerosi studi teorici per permettere la progettazione di materiali sempre più efficaci. In questo studio, sono stati considerati nanomateriali a base di grafene.

Nelle restanti cinquantadue presentazioni orali e ventotto poster, sono state affrontate svariate tematiche. Il campo dei materiali è stato quello più trattato, sia per materiali organici che inorganici, nanomateriali e nanocompositi. Molti dei lavori presentati hanno riguardato preparazione e caratterizzazione di biomateriali per applicazioni mediche, sia di tipo diagnostico che terapeutico, con particolare riferimento a sistemi a base di idrogeli e di nanoparticelle. Un altro campo ampiamente illustrato è stato quello del recupero e valorizzazione di materie prime provenienti da biomasse, in un'ottica di ecosostenibilità ed economia circolare. La valorizzazione di queste materie ha portato alla realizzazione di processi per la produzione di nuovi materiali e nuove materie prime

per l'industria chimica di base. Sempre nel campo della tutela ambientale, molti lavori hanno riguardato sia l'aspetto analitico, attraverso la realizzazione di sistemi per la sensoristica ambientale, che la bonifica. Infine, alcune presentazioni hanno riguardato lo studio di materiali per la catalisi eterogena.

La varietà delle tematiche che sono state presentate conferma la grande multidisciplinarietà che caratterizza questa Divisione. L'elevata qualità scientifica dei contributi unitamente alla presenza di numerosi giovani ricercatori, testimonia una comunità viva e fortemente motivata a far crescere nel futuro la Divisione di Chimica per le Tecnologie.

#### **Division of Chemistry for Technologies**

The works of the Division at the XXVII Congress of the SCI are summarized, which included a total of 59 oral presentations and 28 posters. Various topics were discussed such as materials and nanomaterials, biomaterials for biomedical applications, environmental remediation and biomass enhancement, sensors for environmental and medical analysis, catalysis, computational techniques, attesting the multidisciplinary attitude of the Division.

---

## **SCI2021 - DIVISIONE DI TECNOLOGIA FARMACEUTICA**

Paolo Caliceti<sup>a</sup>, Rosario Pignatello<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Dipartimento di Scienze del Farmaco, Università di Padova

<sup>b</sup>Dipartimento di Scienze del Farmaco e della Salute, Università di Catania

***La Divisione di Tecnologia Farmaceutica (TFA) è entrata a far parte delle Divisioni scientifiche della SCI nel 2018, e pertanto ha partecipato per la prima volta all'organizzazione del Congresso SCI2021, con una partecipazione che è stata vissuta con grande entusiasmo e interesse.***

**L**avori della Divisione di Tecnologia Farmaceutica sono stati organizzati in tre sessioni scientifiche,

svoltesi nei giorni 15, 17 e 21 settembre 2021, dedicate esclusivamente alle tematiche caratteristiche delle di-

scipline tecnologiche farmaceutiche quali lo sviluppo di sistemi di drug delivery, biomateriali, prodotti cosmetici e dietetico-alimentari, ha consentito la condivisione dei risultati delle ricerche condotte nel settore del benessere e della salute svolte in molti centri di ricerca italiani. La partecipazione della comunità della tecnologia farmaceutica italiana in un contesto ampio delle discipline chimiche in SCI2021 ha permesso, inoltre, la disseminazione delle conoscenze in modo interdisciplinare, facendo comprendere meglio le tematiche caratteristiche della ricerca della tecnologia farmaceutica e di cogliere le opportunità scientifiche offerte dalle altre Divisioni. È, infatti, importante sottolineare come lo sviluppo di nuovi prodotti per il benessere e la salute, tra cui i sistemi di veicolazione di farmaci, rappresentino l'aspetto più rilevante, richiedano competenze multidisciplinari, rendendo fondamentale il contributo di diverse aree chimiche. Il convegno ha, quindi, costituito un contesto fertile per le relazioni e le collaborazioni oltre che per l'approfondimento delle conoscenze dei partecipanti del settore della tecnologia farmaceutica.

Nell'ambito delle sessioni plenarie il Prof. Patrick Couvreur dell'Université Paris-Sud France ha tenuto una lecture per la tematica "La chimica per il benessere e la qualità della vita - La salute dell'uomo e la salvaguardia dell'ambiente". Il Prof. Couvreur, uno dei più eminenti scienziati a livello mondiale per quanto riguarda lo sviluppo di nuove tecnologie di veicolazione di farmaci, ha presentato i risultati delle sue ricerche sulla "squalination" (derivattizzazione di farmaci con squalene per l'ottenimento di sistemi colloidali di veicolazione di farmaci con forte carattere interdisciplinare e applicativo). La lecture ha visto un'ampia e interessata partecipazione dei congressisti delle diverse aree chimiche e ha permesso di introdurre in modo eloquente le tematiche che sono poi state oggetto delle giornate della Divisione di Tecnologia Farmaceutica.

L'organizzazione scientifica dei lavori divisionali è stata curata dal Prof. Rosario Pignatello (Università di Catania) e dal Prof. Nunzio Denora (Università di Bari) per quanto riguarda le giornate divisionali, dalla Prof. Anna Fadda (Università di Cagliari) per l'evento satellite dedicato alle biotecnologie, dalla Prof. Carafa (Università Roma Sapienza) per la sessione satellite dedicata ai prodotti cosmetici e dal Dott. Michele Schlich (IIT Genova) per la sessione dedicata ai giovani. Ciascuna delle tre sessioni divisionali è stata introdotta

da due plenary lectures tenute da ospiti stranieri o provenienti dal mondo industriale, seguite da comunicazioni orali con un forte contributo di giovani ricercatori di diversi atenei italiani.

La prima parte di ciascuna sessione è stata dedicata a specifici topics. In particolare, il primo ha riguardato il *delivery* di prodotti biotech, argomento di grande attualità in epoca di sviluppo di vaccini a base di mRNA. Il prof. Elias Fattal dell'Université Paris Sud ha presentato una relazione dal titolo "Lipid and dendrimer-based nanomedicines for siRNA" e il dr. Stefano Colloca, CTO di Reithera, ha presentato una relazione dal titolo "Set up of large scale production process for GRAd-COV2 vaccine".

La sessione del 17 settembre si è focalizzata sulle applicazioni delle tecnologie innovative di *delivery* con particolare riferimento alle sostanze appartenenti all'area nutraceutica degli integratori alimentari. Il dr. Mauro Bonini, Senior R&D and Tech transfer coordinator di Labomar SpA ha presentato alcuni studi di laboratorio nella relazione dal titolo "Release in oral solid nutraceutical forms: case studies".

La terza sessione è stata dedicata infine al *wound healing* e alle terapie rigenerative: la prof.ssa Manuela Estima Gomes, del Research Institute on Biomaterials, Biodegradables and Biomimetics dell'Università di Minho (Braga, Portogallo), ha tenuto una relazione dal titolo "Using magnetic stimulus to bioengineer tendon tissue and tissue models: new tools to understand and stimulate regenerative pathways" in cui sono state illustrate nuove tecnologie e piattaforme per la rigenerazione tissutale. Successivamente, il dr. Marco Romanelli, Direttore della U.O.C. di Dermatologia, Azienda Ospedaliero Universitaria Pisana e Presidente della World Union of Wound Healing Societies, ha esposto una relazione dal titolo "Inflammation in wound healing: the role of drug delivery" in cui è stato approfondito l'aspetto della veicolazione e della formulazione dei farmaci antiinfiammatori nel trattamento delle ferite cutanee e mucosali. La relazione del dr. Marco Fidaleo, del Dipartimento di Biologia e Biotecnologia "C. Darwin" di Sapienza, Università di Roma, dal titolo "A lesson from Vitamin B12: from the biological issues to the design of a nutraceutical formulation" ha permesso una correlazione delle tematiche affrontate durante le tre sessioni organizzate dalla Divisione di Tecnologia Farmaceutica relative allo sviluppo dei prodotti per il benessere e la salute dell'uomo a partire dagli aspetti nutrizionali.

La Divisione di Tecnologia Farmaceutica ha inoltre contribuito all'organizzazione di due eventi satelliti. Il primo "Principi attivi e formulazioni in ambito cosmetico" è stato co-organizzato con la Divisione di Chimica Farmaceutica e ha permesso di presentare i vari aspetti dello sviluppo di prodotti cosmetici, a partire dai materiali utilizzati, gli aspetti analitici e gli aspetti formulativi. In particolare, la Divisione di Tecnologia Farmaceutica ha sviluppato gli aspetti formulativi che rappresentano la parte rilevante nello sviluppo di prodotti cosmetici e per i quali ha una consolidata esperienza con diversi ricercatori che operano in questo settore.

Il secondo evento satellite, organizzato con il contributo della Prof. Anna Fadda, dal titolo "Ruolo della chimica nella produzione e controllo dei medicinali biotecnologici", ha visto il contributo di relatori del mondo produttivo privato e pubblico che hanno affrontato i diversi temi dallo sviluppo dei medicinali alla produzione e gli aspetti regolatori, nonché il trasferimento tecnologico. La sessione si è conclusa con una tavola rotonda.

Infine, i lavori della Divisione di Tecnologia Farmaceutica sono stati chiusi con una tavola rotonda, coordinata dal dr. Michele Schlich, dell'Università di Cagliari, avente per tema "Valorizzazione del dottorato in tecnologia farmaceutica al di fuori dell'accademia: cosa si aspetta un'azienda da un dottore di ricerca rispetto ad un laureato?". La tavola rotonda è stata un'occasione importante e apprezzata in cui si sono confrontate le esperienze di giovani laureati delle no-

stre università che hanno potuto mettere in pratica le conoscenze acquisite durante il percorso di dottorato di ricerca in aziende nazionali e multinazionali del settore farmaceutico, nonché un'occasione di stimolo e riflessione sul ruolo e sul contenuto che i corsi di dottorato impartiti dall'università devono avere per avvicinarsi sempre di più alle richieste del mondo della produzione industriale farmaceutica.

La sessione poster ha accompagnato l'intera durata del congresso e ha visto, per la nostra Divisione, la presentazione di 36 comunicazioni, concernenti diversi e interessanti campi di sviluppo farmaceutico nei quali i gruppi di ricerca delle università italiane sono attualmente impegnati.

La partecipazione della Divisione di Tecnologia Farmaceutica, perfettamente integrata con le tematiche e lo spirito del Congresso SCI, è stata significativa durante i giorni di svolgimento delle varie sessioni a cui si devono aggiungere le partecipazioni post-congressuali che sono state rese possibili dalla registrazione degli interventi.

#### **SCI2021 - Division of Pharmaceutical Technology**

The Division of Pharmaceutical Technology (TFA) joined the scientific divisions of SCI in 2018, and therefore participated for the first time in the organization of the SCI2021 Congress, a participation that was experienced with great enthusiasm and interest.

---

## **L'ELETTROCHIMICA FUCINA PER L'ENERGIA DEL FUTURO**

Vito Di Noto, Piercarlo Mustarelli, Catia Arbizzani

L'Evento Satellite "*La conversione e lo stoccaggio dell'energia chimica in energia elettrica, nella vita odierna e nella società futura*" è stato organizzato dal Prof. Vito Di Noto dell'Università degli Studi

di Padova, dal Prof. Piercarlo Mustarelli dell'Università di Milano-Bicocca e dalla Prof.ssa Catia Arbizzani dell'Università di Bologna a margine del 27° Congresso della Società Chimica Italiana; l'evento si

è tenuto in modalità esclusivamente telematica nel pomeriggio del 22 settembre 2021.

La transizione energetica è uno degli aspetti più importanti degli sforzi profusi a livello europeo e mondiale per mitigare il riscaldamento globale causato dall'immissione di gas-serra nell'atmosfera, con particolare riferimento all'anidride carbonica [1]. È indispensabile implementare su vasta scala tecnologie energetiche nuove, che non richiedano l'utilizzo di combustibili fossili e che siano in grado di sfruttare in modo compiuto ed affidabile le fonti rinnovabili di energia quali il solare e l'eolico. In quest'ottica, le tecnologie di conversione e stoccaggio elettrochimico di energia giocano un ruolo cruciale, consentendo da un lato di chiudere gli sfasamenti spaziali e temporali fra la disponibilità dell'energia ed il suo utilizzo da parte degli utenti finali, e dall'altro di raggiungere livelli di efficienza irraggiungibili da motori termici convenzionali i cui limiti sono stabiliti dal principio di Carnot.



L'Evento Satellite è iniziato con una presentazione del Prof. Doron Aurbach, del Dipartimento di Chimica dell'Università Bar-Ilan, Israele, che ha indicato le più promettenti direzioni della ricerca per far progredire lo stato dell'arte delle batterie al litio, con lo specifico scopo di sostenere la rivoluzione della mobilità elettrica. Il Prof. Aurbach ha descritto nuove famiglie di materiali da utilizzare agli elettrodi delle batterie, capaci di innalzare la quantità di energia in esse immagazzinata ed il numero di cicli di carica e scarica. Il Prof. Aurbach ha anche illustrato come realizzare batterie altamente performanti sfruttando chimiche innovative, con particolare riferimento a sistemi litio-zolfo.

La seconda presentazione dell'Evento Satellite è stata tenuta dal Prof. William Mustain del Dipartimento di Ingegneria Chimica dell'Università del North Carolina, Stati Uniti, che ha discusso nel dettaglio

sistemi elettrochimici a base di membrane alcaline capaci o di produrre energia elettrica dalla reazione elettrochimica fra idrogeno ed ossigeno (celle a combustibile a membrana a scambio anionico, AEMFC) o di produrre idrogeno dalla scissione elettrochimica dell'acqua (elettrolizzatori a membrana a scambio anionico, AEMEL). Tali sistemi risultano di enorme interesse per la loro elevata efficienza e per il fatto che la loro realizzazione richiede un caricamento molto limitato di elementi strategici e molto costosi quali i metalli del gruppo del platino.

L'Evento Satellite è poi proseguito con quattro presentazioni tenute da esponenti di importanti realtà industriali italiane attive nel campo della ricerca e sviluppo di sistemi elettrochimici di conversione e stoccaggio dell'energia. Il Dr. Frédéric Bruyneel di Italmatch Chemicals ha sottolineato l'importanza del riciclaggio degli elementi strategici utilizzati nella realizzazione delle batterie al litio come la via maestra per ridurre la dipendenza dell'Unione Europea dalle importazioni da Paesi terzi, e ha presentato le metodologie più promettenti per conseguire tale scopo in un'ottica di economia circolare e sostenibile. Il Dr. Fabio Bassetto di Breton SpA ha, invece, delineato le attività condotte nell'industrializzazione e nell'implementazione in dispositivo dei materiali elettrocatalizzatori per celle a combustibile a membrana polimerica sviluppati in collaborazione con il gruppo del Prof. Vito Di Noto dell'Università di Padova. Il Dr. Bassetto ha tratteggiato le strategie tese a minimizzare il caricamento di elementi strategici, con particolare riferimento al platino, e ad estendere la durata di vita operativa della cella a combustibile finale. La prima parte dell'Evento Satellite si è conclusa con le presentazioni del Dr. Stefano Saguatti di Manz Italia e del Dr. Claudio Allevi di Saras. Il Dr. Saguatti ha trattato la prospettiva europea dello sviluppo di massicce capacità produttive di batterie al litio per ridurre la dipendenza dalle importazioni da parte di paesi terzi (soprattutto Cina, Giappone e Corea del Sud). Il Dr. Saguatti ha inoltre evidenziato la necessità di trattare in modo olistico l'intera catena di valore delle batterie al litio, includendo il loro utilizzo "second-life" ed il riciclaggio delle loro componenti in modo da dare piena realizzazione allo sviluppo di un sistema di produzione di batterie "Made in Europe" completamente sostenibile dal punto di vista ambientale. Infine, il Dr. Allevi ha condiviso con la platea il progetto di Saras di sviluppare una

centrale di produzione di “idrogeno verde” (ottenuto cioè senza l’emissione di gas-serra) mediante un elettrolizzatore da 20 MW connesso alla rete elettrica ed alimentato con energia ottenuta da fonti rinnovabili. Assolombarda ha contribuito all’Evento Satellite segnalando agli organizzatori Italmatch Chemicals e Saras, ben note per la loro intensa attività nel settore. La seconda parte dell’Evento Satellite ha avuto inizio con una presentazione del Prof. Karim Zaghb, del Dipartimento di Ingegneria Mineraria e dei Materiali dell’Università McGill, Canada, che ha trattato l’intera catena del valore delle batterie al litio di nuova generazione: reperimento delle materie prime, realizzazione dei componenti funzionali (elettrodi ed elettroliti), fabbricazione della batteria e, infine, riciclaggio degli elementi strategici (ad esempio litio e cobalto), indicando i principali “colli di bottiglia” dei processi utilizzati che ostacolano lo sviluppo compiuto di un’economia circolare “verde” in quest’ambito.

In seguito, il Prof. Piercarlo Mustarelli dell’Università di Milano-Bicocca ed il Prof. Vito Di Noto dell’Università di Padova hanno presentato la prospettiva italiana nell’ambito della ricerca dei dispositivi elettrochimici di conversione e stoccaggio dell’energia. Nello specifico, il Prof. Mustarelli si è concentrato nell’ambito delle batterie secondarie ed ha presentato GISEL (“Gruppo Italiano di Sistemi di Accumulo Elettrochimico di Energia”), un Centro di Riferimento affiliato ad INSTM (l’Istituto Nazionale di Scienza e Tecnologia dei Materiali) la cui missione è quella di promuovere la coordinazione della ricerca pubblica e privata in questo settore. Il Prof. Di Noto ha, invece, discusso le attività tese a sviluppare ed implementare su vasta scala l’“eco-

nomia dell’idrogeno”, ponendo quindi particolare attenzione a tecnologie quali le celle a combustibile e gli elettrolizzatori. Il Prof. Di Noto ha descritto il contributo italiano ad importanti progetti e reti di ricerca europei tra cui la Graphene Flagship (Fig. 1) ed il progetto “ALPE”, finanziato dall’European Institute of Technology for Raw Materials e teso a ridurre il caricamento di metalli strategici nelle celle a combustibile. Il Prof. Di Noto ha, infine, presentato alcune importanti iniziative di ricerca italiane quale il progetto “AMPERE”, che mira a sviluppare celle a combustibile ed elettrolizzatori comprendenti membrane a scambio anionico.

L’Evento Satellite si è, infine, chiuso con due interessanti presentazioni, tenute dal Dr. Daniele Testa di Eni e dal Dr. Giuseppe Lodi di FZSoNick SA. Il primo ha tratteggiato la strategia che Eni sta perseguendo con grande vigore per diventare una compagnia “zero-carbon” entro il 2050, implementando politiche di diversificazione del business ed espansione nel campo dell’economia circolare e delle energie rinnovabili, approfondendo sforzi cospicui nella ricerca e nello sviluppo di dispositivi elettrochimici di stoccaggio dell’energia quali batterie al litio e batterie aperte a flusso. Il secondo ha invece trattato il caso di studio delle batterie a cloruri di sodio metallico, focalizzandosi soprattutto sugli aspetti relativi a sicurezza e sostenibilità ambientale di questa tecnologia.

In conclusione il presente Evento Satellite, per la grande autorevolezza dei relatori coinvolti e per l’ampio respiro delle tematiche trattate, ha rappresentato un’opportunità di elevatissimo livello per offrire ai partecipanti un’ampia panoramica sulle più moderne attività di ricerca e sviluppo condotte a livello sia nazionale che internazionale, sia in ambito accademico che industriale, nel merito di una delle componenti più importanti delle tecnologie coinvolte nella transizione energetica: i dispositivi di conversione e stoccaggio elettrochimico dell’energia e la loro implementazione su vasta scala per la realizzazione pratica del sistema energetico del futuro.

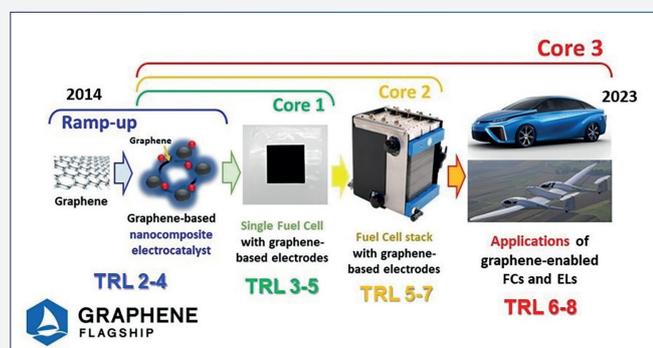


Fig. 1 - Un esempio degli sforzi tesi a promuovere la ricerca e lo sviluppo di dispositivi elettrochimici di conversione dell’energia: il caso delle celle al combustibile realizzate nell’ambito della Graphene Flagship [2]

## BIBLIOGRAFIA

- [1] [https://ec.europa.eu/clima/policies/eu-climate-action\\_en](https://ec.europa.eu/clima/policies/eu-climate-action_en), ultimo accesso 28 ottobre 2021.
- [2] <https://graphene-flagship.eu/>, ultimo accesso 28 ottobre 2021.

# EVENTO SATELLITE: RUOLO DELLA CHIMICA NELLA PRODUZIONE E CONTROLLO DEI MEDICINALI BIOTECNOLOGICI

Anna Maria Fadda, Laura Cipolla, Maria Luisa Nolli, Francesco Peri, Paolo Rovero

**N**ell'ambito del Congresso Nazionale SCI 2021, il 22 settembre pomeriggio ha avuto luogo l'evento satellite "Ruolo della Chimica nella produzione e controllo dei medicinali biotecnologici" organizzato da Anna Maria Fadda (Università di Cagliari), Laura Cipolla (Università di Milano-Bicocca), Maria Luisa Nolli (NCNbio), Paolo Rovero (Università di Firenze) e Francesco Peri (Università di Milano-Bicocca).

Lo scopo della prima parte dell'evento è stato quello di discutere il ruolo delle competenze chimiche nella filiera dei farmaci biotecnologici, con particolare riferimento ai cosiddetti biologici, cioè farmaci costituiti da enzimi, anticorpi, coniugati farmaco-anticorpo (ADC) e, ovviamente, polinucleotidi (DNA, RNA). Le presentazioni e la discussione che si è sviluppata nell'ambito della tavola rotonda finale hanno evidenziato l'importanza di un approccio multidisciplinare nel processo di sviluppo del farmaco biotecnologico, che veda l'integrazione (e l'interazione) di competenze chimiche con know-how derivante dal mondo farmaceutico, medico ed anche economico e giuridico, per quanto riguarda gli aspetti regolatori.

A testimoniare l'importanza della interdisciplinarietà, gli stessi organizzatori hanno selezionato gli speaker da aree di competenza diverse e complementari: Guido Guidi, (direttore dell'acceleratore di impresa Biotech AuroraTT) e Marco Sardina (scientific advisor di Panakes, acceleratore d'impresa nel settore biomedico) dall'area medica; Maria Luisa Nolli (CEO di NCNbio), Sabrina Cazzaniga (AGC Biologics), Michele Barletta (manager farmaceutico e Biopharma Network) e Felice Lopane (Assolombarda, filiera Life Sciences) dall'area

biologico-farmaceutica; Paola Minghetti (Università di Milano) dall'area chimica.

Gli interventi di Maria Luisa Nolli e Sabrina Cazzaniga hanno evidenziato come le terapie avanzate a base di cellule e loro prodotti costituiscano una vera rivoluzione in medicina. I farmaci biotecnologici sono tutti prodotti da cellule in coltura (anticorpi monoclonali, polinucleotidi per terapia genica a base di DNA ed RNA, e proteine ricombinanti) e, recentemente, sono costituiti da cellule come farmaci (ultima generazione). Di fatto il biotech sta dando un forte contributo alla medicina: 350 milioni di pazienti vengono curati ogni anno nel mondo da farmaci biotecnologici ed il 50% dei farmaci sul mercato è oggi costituito da farmaci biotecnologici. Se si paragona la complessità chimica di un farmaco a basso peso molecolare (small molecule) come l'aspirina o l'ibuprofene con quella di un anticorpo monoclonale che pesa diverse centinaia di migliaia di Dalton si può anche intuire come la complessità del processo produttivo, della validazione analitica e della fase regolatoria finale del farmaco biotech sia decisamente maggiore che per il farmaco small molecule. Nella complessità sono incluse istanze etiche legate al fatto che il farmaco biotech deve essere prodotto con elevati standard di qualità per salvaguardare la sicurezza del paziente. La ricerca italiana è ottimamente posizionata poiché ha contribuito a portare sul mercato i primi farmaci per terapie avanzate a base di anticorpi monoclonali. Fondamentale sta diventando l'apporto delle terapie cellulari e geniche per il trattamento delle malattie rare, settore in cui classicamente le aziende farmaceutiche non hanno molto investito e nel quale adesso si vedono interessanti sviluppi ed in-

vestimenti a livello italiano e globale proprio grazie ai farmaci biotech. Paola Minghetti ha presentato le problematiche di sicurezza e sostenibilità legate ai farmaci per le terapie avanzate. Ha fatto un ampio panorama sull'approccio regolatorio, dettagliando la classificazione delle terapie avanzate e portando anche dei casi di prodotti per terapia avanzata che sono stati tolti dal mercato per insostenibilità economica.

È stato evidenziato da Nolli e Guidi come attualmente le big pharma non sviluppino totalmente "in casa" il farmaco biotecnologico per terapie avanzate, ma esternalizzino soprattutto le prime fasi della ricerca preclinica nelle università. L'alleanza con l'accademia è quindi parte del business model delle grandi aziende operanti nel settore biotech. In questo scenario l'università ha, dunque, un duplice ruolo: quello di contribuire alla fase iniziale della filiera dello sviluppo del farmaco biotech, oltre a quello legato alla sua "prima missione" di formare adeguatamente i manager e gli operativi dell'industria biotech. Infine, Guidi, parlando della chimica e dei chimici rispetto a biologi e medici operanti nel settore biotech, ha evidenziato come alle volte ci siano delle barriere comunicative dovute al diverso linguaggio ed al modo di vedere ed affrontare le differenti problematiche concrete e sperimentali. Questo ha dato modo di introdurre la seconda parte dell'evento, in cui ci si è focalizzati sulla formazione ideale di un chimico che operi nel settore biotech e che possa muoversi a suo agio in un ambito multidisciplinare. La Tavola Rotonda che ha costituito la seconda parte dell'evento, è stata dunque focalizzata sul tema del ruolo dell'università e dei corsi di laurea nella formazione dei nuovi manager ed operatori nel settore del farmaco biotecnologico.

Grazie agli interventi di Felice Lopane (Assolombarda), Michele Barletta (Biopharma Network) e Marco Sardina (Panakes) è stato affrontato il problema dell'evoluzione della figura professionale richiesta dalle industrie farmaceutiche biotech e del fatto che i corsi di laurea spesso hanno un'offerta formativa non al passo con queste nuove esigenze. I relatori hanno evidenziato che le seguenti caratteristiche sarebbero desiderabili in un neolaureato destinato al settore delle biotecnologie farmaceutiche:

- 1) formazione multidisciplinare - Nel settore bio-

farmaceutico, le competenze tecniche sono importanti così come la comprensione dei processi aziendali in diverse aree, come ricerca, produzione, market access, comunicazione e aspetti regolatori. Servono competenze manageriali e soft-skills per dialogare all'interno di team multidisciplinari;

- 2) conoscenza delle nuove tecnologie - Biotecnologie innovative, big data e robotica hanno cambiato radicalmente il contesto di riferimento. La conoscenza delle nuove tecnologie, del loro funzionamento e delle loro possibili applicazioni è indispensabile per eccellere nel settore biofarmaceutico;

- 3) flessibilità e disposizione all'apprendimento - "Imparare ad imparare": le università devono preparare gli studenti a mantenersi aggiornati, abituarli ad un mondo in continua evoluzione che necessita di nuove competenze e figure professionali sempre più flessibili;

- 4) percorsi di studio-lavoro - Serve una formazione teorica unita ad applicazioni pratiche per preparare i giovani all'ingresso nel mondo del lavoro. Bisogna incentivare percorsi formativi che includano, ad esempio, esperienze lavorative in azienda, borse di studio e lauree congiunte;

- 5) esperienza internazionale - La conoscenza delle lingue, programmi di scambio tra centri di ricerca internazionali sono oggi esperienze imprescindibili. In base a questi punti, si è cercato di tracciare gli aspetti chiave ritenuti fondamentali nella formazione delle nuove figure professionali da inserire nel mondo del lavoro del settore biotech, che vengono ripresi qui di seguito, in modo schematico: conoscenze e competenze avanzate nelle tecnologie innovative specifiche per i settori (nanotech, biotech, micro e nutraceutica, soft processing, ecc.), competenze tecnologiche avanzate per migliorare la sostenibilità di processi e di prodotto, una formazione estremamente interdisciplinare, un rafforzamento delle competenze manageriali, competenze digitali, attitudine all'innovazione tecnologica e al business affinché l'industria italiana mantenga la leadership internazionale.

È stato, infine, sottolineato chiaramente il ruolo fondamentale delle biotecnologie nel futuro di tutta l'industria nazionale ed internazionale, essendo le biotecnologie intrinsecamente correlate all'innovazione, alla sostenibilità e all'inter- e multidisciplinarietà.

# EVENTO SATELLITE “SOSTENIBILITÀ DI POLIMERI E COMPOSITI”

Maurizio Galimberti  
Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica “G. Natta”  
Politecnico di Milano

Si è svolto, in occasione del XXVII Congresso Nazionale SCI di Milano, 14-23 settembre 2021, l'Evento Satellite “Sostenibilità di Polimeri e Compositi”. In particolare, l'Evento Satellite è stato nel pomeriggio del 22 settembre. Il Comitato scientifico e organizzatore è stato composto da Maurizio Galimberti (Politecnico, Milano), Alexandra Alburnia (Borealis, Linz), Roberto Frassine (Politecnico, Milano) Mario Malinconico (CNR, Napoli), Antonio Protopapa (Corepla), Paola Stagnaro (CNR, Genova). L'Evento è stato uno delle iniziative della Commissione Industria di SCI, che ha, infatti, visto due suoi rappresentanti (Galimberti, Alburnia) coinvolti nell'organizzazione. L'Evento è stato dedicato alla memoria di Mario Malinconico, improvvisamente scomparso durante la scorsa estate.

Obiettivo primario dell'Evento è stato attirare l'attenzione e sviluppare il dibattito sul tema della sostenibilità non solo dei polimeri ma anche dei compositi. È infatti noto che la circolarità e la sostenibilità dei polimeri sono temi sempre più dibattuti, che vedono crescere consapevolezza e preparazione, mentre non è tale la situazione nel caso dei materiali compositi.

L'Evento è stato aperto dalla lecture del prof. Ryan, che si potrebbe riassumere nell'esortazione “*make fossils from plastic, not plastic from fossils*” ed è ben descritto dalle linee guida: “*Making sure we are not distracted by the “convenient truth” of plastics. Understanding how to run a plastic circular economy for now! Contribute to energy defossilization: of electricity, transport and heat. Working out when we can use plastics to sequester CO<sub>2</sub>, by returning to a linear plastics economy. Anthropocene 2.0 - when we start making new fossils*”. Il Prof. Ryan ha opportunamente ricordato quanto

presente sia il (cinico) *greenwashing*. Sovente, i termini *plant based*, *bio*, ecc. sono usati (consapevolmente) a sproposito. Inoltre, un materiale che deriva da fonte naturale non è, solo per questo motivo, sostenibile.

La prima parte dell'Evento è stata dunque dedicata ai materiali plastici.

Il Prof. Briassoulis ha centrato il proprio intervento sull'“*Agricultural Plastic Waste*”, ricordando come 7.0 mt di plastica siano usati ogni anno in agricoltura, generando molto scarto, che è un significativo problema economico ed ambientale. Ha quindi illustrato i risultati del progetto LABELAGRIWASTE “*Labelling agricultural plastic waste for valorising the waste stream*”, che ha avuto l'obiettivo di sviluppare procedure standardizzate e metodologie integrate “*to label the agricultural plastic waste streams*”. Fra i risultati: il primo sistema pilota europeo per gestire l'*empty agrochemical packages* per Grecia, Italia e Cipro.

Il prof. Faravelli ha ricordato quanta cultura, in continuo sviluppo, sia già disponibile per il riciclo chimico delle materie plastiche che passi attraverso reazioni di combustione, confrontando la pirolisi con la gassificazione, presentando quali vantaggi del primo approccio siano la produzione di olii ad alta energia e la possibile produzione di interessanti sottoprodotti quali gas e *char* e come vantaggi del secondo approccio siano la flessibilità del *feed*, la teorica assenza di sottoprodotti e la possibilità di utilizzare il calore prodotto dalla reazione stessa. I modelli cinetici sono dettagliati e consentono di fare previsioni sui prodotti che si ottengono.

Il Dott. Prelato ha centrato il proprio intervento sullo strumento LCA, riportando che le categorie d'impatto più influenzate dal ciclo di vita sono: il



Althaea officinalis

cambiamento climatico, l'acidificazione, il particolato, le risorse fossili, l'uso dell'acqua, l'uso del suolo. Ha, inoltre, ricordato che gli impatti più rilevanti sono solitamente generati nella produzione delle materie prime (fase agricola), che i confronti con altri materiali danno spesso risultati contraddittori e sono raramente condotti con una qualità uniforme dei dati e che gli effetti indiretti legati al fine vita delle bioplastiche sono spesso trascurati o valutati in modo approssimativo. Ha poi indicato importanti limitazioni per le analisi LCA sulle bioplastiche: la differenza nella maturità dei sistemi di produzione, l'obsolescenza e qualità dei dati, l'inclusione degli effetti indiretti, la quantificazione degli impatti del *littering*, la stima del valore delle nuove opzioni di fine vita, la valutazione della cattura e rilascio di CO<sub>2</sub>.

La seconda parte dell'Evento è stata dedicata ai materiali compositi.

L'intervento del Prof. Santacesaria è stato sul riciclo di vetroresine. È stato ricordato come per il riciclo siano già presenti le possibilità di riciclo meccanico, di combustione della materia organica e dei metodi termomeccanici. Questi ultimi appaiono i più convenienti poiché consentono di recuperare quasi tutta la materia organica e la fibra di vetro, bruciando, quindi, le peci e recuperando il calore

sviluppato. Il prodotto riciclato può essere presente nel pre-polimero da utilizzarsi per un nuovo prodotto fino al 20%, senza che le proprietà ne risentano. È stata mostrata la prima realizzazione di un impianto industriale.

Il Prof. Valenza ha mostrato lo stato dell'arte e le prospettive dei compositi con fibre naturali. Lino, canapa, iuta, sisal, kenaf, bambù, cotone sono le più promettenti per sostituire la fibra di vetro, mentre arundo donax, althaea officinalis, sansevieria ehrenbergii, artichoke, piassava e okra vengono utilizzate come materiali di rinforzo per applicazioni civili. I principali vantaggi delle fibre naturali sono: "*low environmental impact compared to synthetic fibres, specific mechanical properties comparable with some synthetic fibres, higher specific properties per unit cost and high renewability*", mentre i principali svantaggi sono: "*durability, variability in the properties of fibres/fabric reinforced composites, low resistance to high temperatures*". È stato ricordato come sia atteso un significativo aumento del loro utilizzo in un futuro prossimo, poiché stanno entrando anche in mercati diversi da quello automobilistico. L'evoluzione della conoscenza sulle fibre naturali consentirà di standardizzare il tipo di fibre disponibili, consentendo una scelta mirata ai tecnologi.

La Dott.ssa Pessina ha ricordato come l'impatto sull'ambiente di uno pneumatico sia in larga misura durante il suo utilizzo. Il focus di un'azienda come Pirelli è sui seguenti punti: *safety first, products eco and safety performance, materials innovation, towards decarbonization*. Per l'impatto sull'ambiente dello pneumatico, durante il suo utilizzo, l'obiettivo principale è ridurre la sua *rolling resistance*. Aspetti di primaria importanza lungo tutto il ciclo di vita sono: l'elettricità da fonti rinnovabili, il valore assoluto di emissione di CO<sub>2</sub>, stimato a partire dai produttori di materie prime, il consumo di acqua e gli scarti indirizzati al riciclo.

Nella tavola rotonda finale, da attori di primaria importanza nel settore dei materiali, è stato ricordato che aspetti quali la reale conoscenza dei dati relativi a tutta la filiera dei materiali, la legislazione, l'eco-design, il riciclo, l'impatto ambientale devono essere vissuti in spirito di collaborazione fra tutti i protagonisti, sviluppando le necessarie sinergie. Questi aspetti dovranno necessariamente essere sviluppati in future iniziative della Società Chimica Italiana.