Anno 2013

Università degli Studi di PERUGIA >> Sua-Rd di Struttura: "CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"

B.1.b Gruppi di Ricerca

1. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Metodologie innovative nella Sintesi Organica
Descrizione	La chimica ha un ruolo importante da svolgere nella realizzazione di una civiltà sostenibile sulla Terra. Una prova è data dalla storia recente della US Environmental Protection Agency (US EPA), fondata nel 1970. Inizialmente, US EPA ha adottato (come in Europa) una politica di "ordine e controllo" nell'esecuzione delle normative ambientali, mentre nel 1980 è iniziato un profondo cambiamento del paradigma esistente. La prevenzione dell'inquinamento è divenuta la priorità sostituendo il controllo di fine processo. Di conseguenza, l'applicazione di questo approccio ha richiesto di progettare completamente ex novo i processi chimici esistenti e necessari rendendo subito evidente il ruolo strategico dei chimici. Con il Pollution Prevention Act, approvato dal Congresso americano nel 1990, gli Stati Uniti d'America hanno ufficialmente posto l'attenzione sulle "milioni di tonnellate di inquinamento" e il relativo costo di "decine di miliardi di dollari l'anno". Con questo atto si sancisce la necessità economica ed ambientale di definire una chiara strategia della minimizzazione dei rifiuti che porta ad introdurre quelli che sono i fondamenti della Green Chemistry. La ricerca del gruppo "Metodologie innovative nella Sintesi Organica" è finalizzata alla definizione di metodologie sintetiche ecocompatibili e chimicamente efficienti. Le caratteristiche principali del nostro approccio sono: l'uso mi mezzi di reazione alternativi ai solventi organici tossici, progettazione e sintesi di catalizzatori eterogenei recuperabili, definizione di protocolli di reazione operanti in flusso per la sintesi automatizzata di materiali di interesse in diversi settori di applicazione quali la chimica farmaceutica e dei semiconduttori organici. Il gruppo è costituito da due unità di ricerca: - Green Synthetic Organic Chemistry, responsabile Prof. Luigi Vaccaro http://www.dcbb.unipg.it/greensoc - alta pressione in sintesi organica, responsabile Prof. Lucio Minuti
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/67
Responsabile scientifico/Coordinatore	PIZZO Ferdinando (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
PE4_10 - Heterogeneous catalysis
PE5_15 - Polymer chemistry
PE5_17 - Organic chemistry
PE8_12 - Sustainable design (for recycling, for environment, eco-design)
PE8_6 - Energy systems (production, distribution, application)
SH3_1 - Environment, resources and sustainability

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BALLERINI	Eleonora	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/06
BARTOLLINI	Elena	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
MINUTI	Lucio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/06
MARROCCHI	Assunta	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/06
PIERMATTI	Oriana	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/06
PETRUCCI	Chiara	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
STRAPPAVECCIA	Giacomo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
VACCARO	Luigi	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/06

2. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Biodiversità ed Ecologia
Descrizione	Il Gruppo di Biologia Animale ed Ecologia svolge la sua attività di ricerca , sia di base che applicata, su un vasto range di organismi, dalle piante (funghi, muschi, licheni, cormofite) agli invertebrati (plancton, crostacei, insetti, briozoi) ai vertebrati (pesci, tetrapodi), con studi di laboratorio e di campo, tramite indagini di carattere morfologico-funzionale, comportamentale, genetico ed ecotossicologico. Particolare attenzione è rivolta allanalisi della biodiversità a livello specie, e alle interazioni organismo/ambiente, valutate negli aspetti qualitativi e quantitativi su scala locale e globale. Le indagini sono volte al progresso delle conoscenze nellambito della biologia delle piante e degli animali, alla sostenibilità delluso antropico delle risorse, alla conservazione della biodiversità.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/271
Responsabile scientifico/Coordinatore	VENANZONI Roberto (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
LS3_1 - Morphology and functional imaging of cells
LS5_4 - Sensory systems (e.g. visual system, auditory system)
LS8_1 - Ecology (theoretical and experimental; population, species and community level)
LS8_3 - Systems evolution, biological adaptation, phylogenetics, systematics, comparative biology
LS8_4 - Biodiversity, conservation biology, conservation genetics, invasion biology
LS9_3 - Agriculture related to animal husbandry, dairying, livestock raising
LS9_4 - Aquaculture, fisheries

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BICCHIERAI	Maria Clara Rita	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	BIO/05
BRICCHI	Emma	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/02
DOERR	Ambrosius Josef Martin	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	BIO/07
GIGANTE	Daniela	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/03
GORETTI	Enzo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/05
LUDOVISI	Alessandro	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/07
ELIA	Antonia Concetta	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/07
LORENZONI	Massimo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/07
PALLOTTINI	Matteo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/07
POMPEI	Laura	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/05
PIERSANTI	Silvana	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ric. a tempo determ.	BIO/05
REBORA	Manuela	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/05
SCOPARO	Melissa	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/05

3. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Biochimica e Biologia Molecolare
Descrizione	IL Gruppo di ricerca di Biochimica e Biologia Molecolare si occupa di Biochimica, biologia molecolare e nanotecnologia al fine di indagare il sistema endosomiale-lisosomiale nella salute, nell'invecchiamento e nelle malattie neurodegenerative al fine di definire nuove strategie terapeutiche. La ricerca è inoltre rivolta all'identificazione dei fattori di rischio e protettivi per la prevenzione delle malattie cronico-degenerative
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/318

Responsabile scientifico/Coordinatore	EMILIANI Carla (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
LS1_2 - General biochemistry and metabolism
LS1_6 - Lipid synthesis, modification and turnover
LS3_12 - Stem cell biology
LS6_10 - Parasitology
LS7_10 - Environment and health risks, occupational medicine
LS7_2 - Diagnostic tools (e.g. genetic, imaging)
LS7_6 - Gene therapy, cell therapy, regenerative medicine

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BICCHI	Ilaria	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/11
BAGLIONI	Mauro	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/10
BURATTA	Sandra	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/10
DI CRISTINA	Manlio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/11
FABIANI	Roberto	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	MED/42
FERRO	Francesca	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/11
MORENA	Francesco	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/11
MARTINO	Sabata	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/11
PENNONI	Ilaria	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/11
PESCARA	Teresa	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/11
ROSIGNOLI	Patrizia	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	MED/42
SEPPORTA	Maria Vittoria	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	MED/42
TANCINI	Brunella	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/10
VANNINI	Samuele	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	MED/42

---

4. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Diversità Bio-Molecolare e Biologia Evoluzionistica
Descrizione	Lattività di ricerca del gruppo è volta principalmente allo studio della diversità molecolare, cellulare e dello sviluppo di organismi a differenti livelli di complessità evolutiva: microrganismi, piante, animali e Uomo. Le relazioni tra gli individui e/o le popolazioni e tra questi e l'ambiente, sono indagate attraverso avanzate tecniche di analisi genomica e metodologie cellulari e morfometriche. Tale approccio multidisciplinare permette di fornire un'esaustiva descrizione della biodiversità naturale, ponendo il Gruppo "Diversità Bio-Molecolare e Biologia Evoluzionistica" come riferimento del settore sia per la ricerca di base che per quella applicata. La suddetta attività si svolge in specifici ambiti di ricerca quali: Microbiologia applicata ed ambientale, che si occupa dello studio, basato su approcci biomolecolari, della diversità strutturale e funzionale delle comunità microbiche nell'ambiente (suolo, acqua, organismi ospiti), nei processi biotecnologici (biorisanamento, trattamento e valorizzazione dei rifiuti) e nella salute umana (interazioni con xenobiotici, antigenotossicità dei probiotici). Citologia nucleare vegetale, che si occupa dello studio della struttura e dellorganizzazione del genoma vegetale; dellanalisi delle variazioni intraspecifiche della frazione ripetitiva del genoma in relazione alle dinamiche di sviluppo dellindividuo e alladattamento ambientale; di citogenetica molecolare e delluso dei marcatori molecolari nella discriminazione varietale in specie di interesse agronomico, e nella tracciabilità agroalimentare. Biologia cellulare e dello sviluppo vs ambiente, che si occupa (a) dello studio integrato delle risposte biologiche indotte da stress ambientali in organismi sentinella (a differenti livelli di organizzazione biologica) come strumento per la valutazione del rischio ambientale in un ottica di preservazione e tutela della biodiversità; (b) dello studio delle risposte biologiche indotte da stress fisici e chimici in modelli di sviluppo con potenziali applicazioni in campo farmaceutico e bio-medico. Genetica delle popolazioni, genetica della conservazione ed evoluzione molecolare, che si occuopa diellanalisi genetica

	della variazione di sequenza del DNA mitocondriale e nucleare con l'obiettivo di: 1) chiarire origini, evoluzione e modelli di dispersione delle popolazioni umane e animali (domestici e selvatici); 2) definire su basi molecolari le relazioni tassonomiche tra specie, sia domestiche sia selvatiche; 3) salvaguardare la biodiversità attraverso studi conservazionistici e di ecologia molecolare; 4) evidenziare e descrivere il potenziale ruolo delle varianti genetiche in studi di associazione e nelle indagini forensi; 5) identificare metodologie molecolari di tracciabilità alimentare, con particolare riferimento alle specie dinteresse in acquacoltura.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/269
Responsabile scientifico/Coordinatore	FEDERICI Ermanno (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
LS2_1 - Genomics, comparative genomics, functional genomics
LS3_5 - Cell differentiation, physiology and dynamics
LS3_6 - Organelle biology
LS3_9 - Development, developmental genetics, pattern formation and embryology in animals
LS8_10 - Microbial ecology and evolution
LS8_11 - Species interactions (e.g. food-webs, symbiosis, parasitism, mutualism)
LS8_2 - Population biology, population dynamics, population genetics
LS8_3 - Systems evolution, biological adaptation, phylogenetics, systematics, comparative biology
LS8_4 - Biodiversity, conservation biology, conservation genetics, invasion biology
LS9_3 - Agriculture related to animal husbandry, dairying, livestock raising
LS9_5 - Agriculture related to crop production, soil biology and cultivation, applied plant biology
LS9_8 - Environmental biotechnology, bioremediation, biodegradation
LS9_9 - Applied biotechnology (non-medical), bioreactors, applied microbiology

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BABUDRI	Nora	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	BIO/18
CECCARELLI	Marilena	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/01
ACHILLI	Alessandro	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/18
CENCI	Giovanni	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	BIO/19
CARDINALI	Irene	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	BIO/18
CIROTTO	Carlo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	BIO/06
DE MARCHIS	Francesca	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/01
DI ROSA	Ines	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	BIO/06
FAGOTTI	Anna	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/06
LUCENTINI	Livia	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/06
LANCIONI	Hovirag	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ric. a tempo determ.	BIO/18
PANARA	Fausto	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	BIO/06

---

5. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Fisiopatologia Cellulare e Molecolare
	I principali interessi di questo gruppo si rivolgono ai canali ionici delle cellule nervose e gliali del cervello, al loro ruolo nelle normali funzioni neuronali e gliali, e alle patologie che risultano dal loro malfunzionamento. I canali ionici sono proteine integrali di membrana con un poro centrale per il passaggio controllato di ioni. Essi costituiscono elementi chiave nel controllo dei segnali nervosi. La scoperta di numerose patologie che hanno alla base mutazioni in geni che codificano per canali ionici (canalopatie) ha recentemente dato grande impulso allo studio degli aspetti molecolari e

Descrizione	cellulari di queste proteine, e in molti casi, come alcune forme genetiche di epilessia, emicrania, autismo, dolore cronico, ha chiarito i meccanismi molecolari della loro insorgenza, e indicato più efficaci approcci terapeutici. Più recentemente alcune forme di tumori, come il glioblastoma, che mostrano forti disregolazioni funzionali di specifici canali ionici che controllano laggressività tumorale sono state identificate come canalopatie. Il Gruppo di ricerca si interessa anche della neurogenesi cerebrale, della funzione benefica di composti naturali (nutraceutici; principalmente germogli di grano) nella prevenzione di numerose patologie, specialmente quelle collegate allinvecchiamento, e degli effetti delle nanoparticelle sul sistema nervoso centrale.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/270
Responsabile scientifico/Coordinatore	FRANCIOLINI Fabio (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
LS3_2 - Cell biology and molecular transport mechanisms
LS4_1 - Organ physiology and pathophysiology
LS4_3 - Endocrinology
LS4_4 - Ageing
LS4_5 - Metabolism, biological basis of metabolism related disorders
LS4_6 - Cancer and its biological basis
LS5_2 - Molecular and cellular neuroscience

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
CARAMIA	Martino	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/09
CATACUZZENO	Luigi	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/09
MICHELI	Maria Rita	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/18
MARSILI	Valeria	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/09
SECCA	Teresa	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/09
SFORNA	Luigi	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	BIO/09

---

6. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Calcoli, teoria ed esperimenti per studi di dinamica e cinetica dei processi chimici
Descrizione	Questo gruppo di ricerca si occupa di 1. teoria dei processi chimici elementari: Teoria quantistica e semiclassica dei processi chimici elementari a tre e quattro centri per lo studio teorico dei fattori cinetici di controllo della reattività. Processi nonadiabatici, collisioni fredde e processi di trasferimento di idrogeno e protoni. Chimica delle atmosfere terrestre e planetarie. Studio teorico di reazioni fotodissociazione. Chiralità in collisioni molecolari. Simboli nj e reti di spin. 2. Dinamica e cinetica computazionale: Trattamenti quantistici, classici e semiclassici dei processi chimici elementari reattivi e non reattivi a pochi corpi per il calcolo delle relative proprietà collisionali. Dinamica molecolare di sistemi a molti corpi e calcolo delle loro proprietà. Calcoli chimici ad alte prestazioni e ad alto flusso su piattaforme parallele e distribuite e gestione delle relative Organizzazioni e Comunità di Ricerca Virtuali. Elaborazione automatica dei dati e della conoscenza chimica per calcoli chimici e didattica. 3. forze intermolecolari e dinamica molecolare da esperimenti collisionali: La tecnica dei fasci molecolari è usata per misurare oscillazioni di interferenza quantistica nelle sezione durto di collisione, dipendenti dallenergia di interazione tra proiettile e bersaglio. I risultati sono di interesse per descrivere la stabilità di aggregati molecolari debolmente legati e la selettività di reazioni chimiche. 4. Studi sperimentali di dinamica molecolare delle reazioni chimiche: La dinamica molecolare delle reazioni chimiche elementari e' investigata mediante la tecnica dei fasci molecolari incrociati con rivelatore rotante a spettrometro di massa a quadrupolo ed analisi in tempo di volo. Sono studiate reazioni di interesse in combustione, atmosfera ed astrochimica, come quelle di atomi (ossigeno, azoto, carbonio, zolfo) e radicali (ossidrile, dicarbonio, ciano) con idrocarburi. La tecnica permette di identificare i prodotti primari e caratterizzarne la dinamica di formazione e resa relativa. Per sistemi semplici i risultati sono spesso confrontati con predizioni teoriche da calcoli di scattering quasiclassico e/o quantistico su superfici di energia potenziale ab initio nell'ambito di collaborazioni internazionali
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/48

Responsabile scientifico/Coordinatore	LAGANA' Antonio (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
PE4_12 - Chemical reactions: mechanisms, dynamics, kinetics and catalytic reactions
PE4_13 - Theoretical and computational chemistry
PE6_4 - Theoretical computer science, formal methods, and quantum computing

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BALUCANI	Nadia	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/03
BARTOCCI	Alessio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
CASAVECCHIA	Piergiorgio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	CHIM/02
CAVALLI	Simonetta	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/03
GROSSI	Gaia	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	CHIM/03
LOMBARDI	Andrea	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/03
PACIFICI	Leonardo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03
PIRANI	Fernando	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	CHIM/03
VANUZZO	Gianmarco	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03

---

7. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Spettroscopia molecolare di sistemi in fase condensate -
Descrizione	Il nostro gruppo di ricerca è interessato alle proprietà strutturali e dinamiche di un ampio range di sistemi molecolari in fase condensata, studiati con diverse tecniche spettroscopiche. Dalla solvatazione ionica alla crioconservazione di cellule staminali, mediante lo studio di sistemi con diversi gradi di complessità, siamo coinvolti nei seguenti progetti di ricerca, associabili ai settori ERC PE4_2 (Spectroscopic and spectrometric techniques) e PE4_11 (Physical Chemistry of biologic systems). Studio delle dinamiche di solvatazione di diversi sistemi molecolari. Da semplici elettroliti a zuccheri, proteine e altre molecole di interesse biologico: questi i sistemi esaminati, tutti in soluzioni acquose o miscele acquose, allo scopo di identificare e descrivere selettivamente la dinamica dei soluti e quella dei solventi, sia nelle prime shell di solvatazione che nel bulk. Sono state utilizzate tecniche spettroscopiche di light scattering, in particolare di Rayleigh depolarizzato, Raman sia a basse che ad elevate frequenze, Brillouin e scattering dinamico. In collaborazione con il LENS (Laboratorio Europeo di Spettroscopie Non Lineari) di Firenze, sono stati effettuati studi mediante tecniche risolte nel tempo con impulsi ultracorti (<100 fs). Progetti recenti in tale ambito riguardano: a) la caratterizzazione di cromofori che sono sottoposti a transizioni di trasferimento di carica; b) processi fotobiologici ultraveloci; c) reattività dello stato eccitato. Denaturazione termica di proteine globulari: sono state caratterizzate la termodinamica e la cinetica dei processi di denaturazione e aggregazione di proteine globulari, mediante tecniche FTIR e microRaman, in un ampio range di temperature e in differenti condizioni di solvatazione. E stata anche identificata la crescita di specie pre-fibrillari mediante tecniche di emissione di fluorescenza, microscopia a forza atomica e dicroismo circolare vibrazionale. Crioconservazione cellulare: in collaborazione con il Centro Nazionale Trapianti (Istituto Superiore di Sanità), sono stati effettuati studi per individuare le criticità nei protocolli di crioconservazione di cellule staminali di origine umana utilizzate in applicazioni cliniche. A tale scopo, sono state riprodotte le procedure standard utilizzate in alcune biobanche di sangue cordonale (come ad esempio quella dellospedale Careggi a Firenze), su campioni di linee cellulari modello, in particolare linfociti e fibroblasti. Sono state usate tecniche di spettroscopia vibrazionale FTIR e microRaman, in prima istanza per seguire le modifiche a carico della membrana cellulare, seguendo le variazioni di posizione e forma di banda di opportuni segnali vibrazionali. In questo modo è possibile osservare i processi di congelamento e scongelamento delle cellule staminali in presenza di crioconservanti, per ottimizzarli sia in termini di modalità di variazione di temperatura che di composizione delle miscele crioprotettive. Effetti osmotici in membrane cellulari modello: sono stati caratterizzati gli effetti di diluizione di liposomi e ghost di eritrociti in soluzioni ipertoniche di DMSO e glucosio per testare la permeabilità di membrane cellulari modello mediante spettroscopia di fotocorrelazione, assorbimento IR e analisi termica differenziale.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/57
Responsabile scientifico/Coordinatore	MORRESI Assunta (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
PE4_1 - Physical chemistry

PE4_11 - Physical chemistry of biological systems
PE4_2 - Spectroscopic and spectrometric techniques

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
FOGGI	Paolo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	CHIM/02
PAOLANTONI	Marco	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/02
RICCI	Maria	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/02
SASSI	Paola	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/02

---

8. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Scienze e Tecnologie Chimiche per lAmbiente
Descrizione	L'attività scientifica del gruppo si concentra su vari aspetti della chimica ambientale, che comprende le energie rinnovabili, la chimica dell'atmosfera e la fisica, la chimica di acqua e neve, e le applicazioni della chimica analitica per la caratterizzazione dei campioni ambientali. Le tematiche di ricerca riguyardano: - Sviluppo di tecnologie avanzate nel campo delle energie rinnovabili. La digestione anaerobica dei rifiuti biologici per la produzione di biogas; applicazione di idrati di gas per l'aggiornamento biogas di qualità. (reponsabile S.Santini) Chimica e fisica dei gas atmosferici e aereosol, monitoraggio degli aerosol atmosferici a (rurali, polari) siti urbani e remoti; l'inquinamento dell'aria interna. Modellizzazione delle concentrazioni di inquinanti, di diffusione e di trasporto a lunga distanza nell'atmosfera. Coordinatore D.Cappelletti) - Applicazione di metodologie analitiche avanzate attraverso il monitoraggio, la caratterizzazione diagnostica e la chimica dei campioni di varie matrici ambientali, tra cui: acqua minerale, fiume e l'acqua del lago, il particolato, il suolo, fossile e biomasse combustibili derivati, prodotti alimentari. (Coordinatore S. Santini)
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/403
Responsabile scientifico/Coordinatore	SANTINI Sergio (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
PE10_1 - Atmospheric chemistry, atmospheric composition, air pollution
PE10_3 - Climatology and climate change
PE4_1 - Physical chemistry
PE4_15 - Photochemistry
PE4_3 - Molecular architecture and Structure
PE4_6 - Chemical physics
PE4_8 - Electrochemistry, electrodialysis, microfluidics, sensors
PE5_13 - Homogeneous catalysis

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
CAPPELLETTI	David Michele	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/07
CROCCHIANTI	Stefano	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/03
CASTELLINI	Silvia	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03
MORONI	Beatrice	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03

---

9. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Chimica Inorganica per la Catalisi e lEnergia
Descrizione	Lattività del gruppo riguarda essenzialmente processi e materiali che consentono la conversione ecosostenibile dellenergia ed è organizzata in tre principali linee di ricerca: 1) Materiali inorganici ed elettroliti polimerici compositi per laccumulo e la conversione dellenergia, 2) Sintesi di materiali inorgano-organici con structura a strati e framework per la catalisi e lassorbimento di gas e 3) Catalizzatori Molecolari per la Polimerizzazione di Olefine e per lOssidazione dellAcqua. La prima linea di ricerca intende sviluppare nuovi elettroliti polimerici compositi destinati a dispositivi elettrochimici per laccumulo e la conversione dellenergia, quali celle a combustibile, elettrolizzatori e batterie redox a flusso. Lattività di ricerca è articolata in due linee principali: i) sintesi e caratterizzazione di nanomateriali ibridi inorgano-organici da impiegare come fillers di elettroliti polimerici, e ii) loro impiego nello sviluppo di elettroliti polimerici nanocompositi che, rispetto al solo polimero, presentino migliorate proprietà meccaniche, termiche e di barriera mantenendo (e possibilmente migliorando) le proprietà di trasporto ionico del polimero. La seconda linea di ricerca è focalizzata sulla progettazione, sintesi e applicazione di nuovi materiali a base di idrotalciti (Layered Double Hydroxides, LDH) e fosfonati di metalli di transizione ad alto stato di ossidazione con struttura disegnata su misura. Le LDH sono composti inorganici a strati che possiedono anioni scambiabili nella regione interstrato. I fosfonati metallici sono materiali ibridi che, a seconda della forma, flessibilità e funzionalità dei leganti fosfonici, presentano unampia varietà strutturale, comprendente sia strutture a strati che strutture framework con un certo grado di porosità. Entrambi i tipi di materiali trovano applicazione in molti campi considerati, al giorno doggi, di importanza cruciale, come la catalisi nelle reazioni che utilizzano solventi green, la degradazione foto catalitica, lassorbimento e la separazione di gas. La terza linea di ricerca è incentrata sulla sintesi, la caratterizzazione strutturale e lapplicazione in catalisi di due classi di composti: i) complessi metallocenici e post-metallocenici per la polimerizzazione di olefine e ii) complessi organometallici robusti per lossidazione dellacqua a ossigeno molecolare. Per quanto riguarda la prima classe di composti, lo scopo principale è quello di razionalizzare gli effetti di coppia ionica e, più in generale, delle interazioni intra- e inter-molecolari, catalizzatore/co-catalizzatore, nelle prestazioni catalitiche. Per quanto riguarda la seconda classe di composti, va sottolineato che lossidazione dellacqua è un processo essenziale per la realizzazione di un apparato fotosintetico artificiale finalizzato alla sintesi di combustibili solari. Il nostro gruppo di ricerca è impegnato nella sintesi di efficienti catalizzatori organometallici omogenei ed eterogenizzati (su supporti fotoattivabili) per lossidazione dellacqua, progettati per poter essere facilmente integrati in una cella fotoelettrochimica.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/92
Responsabile scientifico/Coordinatore	CASCIOLA Mario (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
PE4_17 - Characterization methods of materials
PE4_2 - Spectroscopic and spectrometric techniques
PE4_3 - Molecular architecture and Structure
PE4_8 - Electrochemistry, electrodialysis, microfluidics, sensors
PE5_13 - Homogeneous catalysis
PE5_6 - New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles
PE5_9 - Coordination chemistry

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BUCCI	Alberto	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
BELLACHIOMA	Gianfranco	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/03
CORBUCCI	Ilaria	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
COSTANTINO	Ferdinando	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/03
DONNADIO	Anna	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03
MACCHIONI	Alceo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	CHIM/03
MARMOTTINI	Fabio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/07
PASTORI	Gabriele	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03
ROCCHIGIANI	Luca	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03
ZUCCACCIA	Cristiano	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/02

10. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Materiali per la conservazione delle opere darte
Descrizione	Il Gruppo di ricerca si occupa di: - Struttura e composizione di materiali eterogenei in opere di interesse storico, artistico e archeologico per la diagnostica sul loro stato di conservazione. Origine e meccanismi di degrado dei materiali. - Metodi spettroscopici per lo studio di micro-campioni e per la caratterizzazione di materiali in sezioni stratigrafiche. Metodologie diagnostiche per la protezione e consolidamento di materiali porosi. Diagnostica non-invasive per la caratterizzazione di tecniche esecutive nellarte contemporanea. -Definizione di protocolli di intervento per la manutenzione programmata e la protezione di oggetti di interesse storico-artistico in caso di calamità naturali. - Comportamento chimico e fisico dei materiali in relazione con lambiente e metodologie di monitoraggio ambientale in strutture museali. Le indagini sperimentali includono misure con luce di sincrotrone e altre misure con tecniche micro-FT-IR, micro-Raman, fluorescenza X, fluorescenza UV-vis, diffrazione X, ICP-AES, LA-ICP-MS, NMR relaxation e spettroscopia di assorbimento X con luce di sincrotrone.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/61
Responsabile scientifico/Coordinatore	BRUNETTI Brunetto Giovanni (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
PE4_17 - Characterization methods of materials
PE4_18 - Environment chemistry
PE4_2 - Spectroscopic and spectrometric techniques
PE4_5 - Analytical chemistry

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
GABRIELI	Francesca	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
GRAZIA	Chiara	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/12
MANCINELLI	Noemi	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03
MAURICH	Celeste	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
PRESCIUTTI	Federica	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/03

11. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Fotofisica e fotochimica
Descrizione	Il gruppo di fotofisica e fotochimica si occupa dello studio del comportamento dei materiali con la radiazione elettromagnetica UV-Vis mediante tecniche spettrofotometriche e fluorimetriche stazionarie e risolte nel tempo. I temi principali su cui si sviluppa l'attività di ricerca sono: - Comportamento fotochimico dei farmaci: studio delle proprietà fotofisiche e fotochimiche di composti di interesse farmaceutico e biologico e delle loro interazioni con bersagli biologici (polinucleotidi, proteine e DNA). - Fotochimica di aril olefine: proprietà di luminescenza, fotoreazione (isomerizzazione, ciclizzazione), meccanismi ed equilibri conformazionali di diarileteni e distyrylarenes. - Sistemi Cromogenici: lo studio riguarda diversi aspetti correlati fra loro quali (i) comportamento spettrale e cinetico di nuovi composti fotocromici; (ii) inclusione di composti fotocromici in sistemi organizzati e matrici solide al fine di controllare il comportamento ottico del materiale; (iii) ruolo dell eccitazione selettiva elettronica e vibronica sulla reazione fotocromatica. - Materiali nanostrutturati: (i) Sintesi e caratterizzazione morfologica di nanoparticelle inorganiche e colloidali ibride utili per applicazioni bio-mediche e di conversione di energia; studio del comportamento fotofisico e fotochimico del nanomateriale in funzione della funzionalizzazione superficiale. (ii). preparazione e caratterizzazione di composti di inclusione formati da solidi nanostrutturati inorganici e coloranti organici; studio delle proprietà ottiche e fotochimiche dei coloranti in funzione della loro disposizione nelle matrici; valutazione delle interazioni dei compositi organici/inorganici con biomacromolecole. - Materiali utilizzati nelle opere d'arte: processi di caratterizzazione spettrale e fotodegradazione di coloranti e additivi presenti negli strati pittorici (leganti e vernici) e artistiche tessili (mordenti); assemblaggio e validazione di strumentazione portatile. Indagine su campioni di laboratorio (mimando materiali utilizzati per le superfici policrome) ed

	opere originali utilizzando tecniche in situ di riflettanza fluorimetrica e spettrofotometrica non distruttiva. - Scintillatori: proprietà ottiche di scintillatori liquidi. Ottimizzazione delle loro prestazioni (resa emissione, tempo di risposta, lunghezza attenuazione, durata) per il loro uso in larga scala in rivelatori di neutrini solari e le ricerche di materia oscura. - Preparazione e caratterizzazione di foto-catalizzatori per la scissione dell'acqua tramite energia solare. - Processi ultraveloci: misure spettro-cinetica al femtosecondo in assorbimento e emissione (λecc = 266 e 300-600 nm) per studiare i meccanismi di reazioni fotoindotte allo stadio iniziale dopo l'eccitazione e dinamica del mezzo che circonda lo stato eccitato - Progettazione, sintesi e caratterizzazione di molecole anfifiliche e liquidi ionici - L'attività di ricerca è focalizzata sullo studio della reattività chimica e biochimica, trasporto e veicolazione di molecole biologicamente attive in presenza di sistemi supramolecolari anfifilici, gel e liquidi ionici. L'obiettivo finale è quello di preparare materiali specifici da impiegare in numerose applicazioni nel campo della chimica, biomedicina e più in generale nel campo della scienza dei materiali. Più recentemente un forte interesse è inoltre dedicato allo studio degli effetti di nanostrutture anfifiliche sulla fotofisica e proprietà fotochimiche di tetracicline e chemosensori. - Chemosensori: Chemosensori cromogenici e fluorescenti sono sviluppati per rivelare rapidamente e selettivamente specie ioniche in soluzioni acquose e micellari. L'obiettivo è l'ottimizzazione di questi sistemi per rivelare la presenza di ioni in test cellulari in-vitro ed in-vivo. - Reazioni fotocatalizzate da TiO2: indagini meccanicistiche sugli intermedi formati durante il processo di fotoossidazione da parte di TiO2 di composti organici in soluzione acquosa e soluzioni di tensioattivi, al fine di avere informazioni utili sui processi di degradazione nella fase di mineralizzazione di inquinanti organici nelle acque reflue.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/66
Responsabile scientifico/Coordinatore	ELISEI Fausto (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
LS5_4 - Sensory systems (e.g. visual system, auditory system)
PE4_1 - Physical chemistry
PE4_12 - Chemical reactions: mechanisms, dynamics, kinetics and catalytic reactions
PE4_15 - Photochemistry
PE4_17 - Characterization methods of materials
PE5_18 - Molecular chemistry
PE5_3 - Surface modification
PE5_4 - Thin films
PE5_6 - New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles
PE8_6 - Energy systems (production, distribution, application)
PE8_9 - Materials engineering (biomaterials, metals, ceramics, polymers, composites...)

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
CLEMENTI	Catia	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/02
CARDELLINI	Fabio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
CESARETTI	Alessio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/02
DEL GIACCO	Tiziana	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/06
GENTILI	Pier Luigi	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/02
GERMANI	Raimondo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	CHIM/06
GRAZIA	Chiara	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/12
LATTERINI	Loredana	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/02
MASSARO	Giuseppina	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/02
MAZZOLI	Alessandra	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/02
NUCERA	Francesco Domenico	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/02
ROMANI	Aldo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/12
ORTICA	Fausto	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/02
SPALLETTI	Anna	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/02

ZAMPINI	Giulia	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/02

12. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Fisiologia e biochimica delle piante
Descrizione	Il gruppo di ricerca ha attivato diverse linee di ricerca: 1. Ormoni vegetali (acido salicilico ed acido abscissico), molecole segnale (H2O2 e ossido nitrico) e composti organici volatili (VOCs) in piante sottoposte a stress abiotico (stress idrico) in interazione con stress biotico (insetti erbivori fitofagi e relativi insetti parassitodi): Lo scopo della ricerca è quello di studiare come le alterazioni dellapparato radicale in risposta a stress idrico possa impattare sulle molecole segnale a livello di parte aerea. Le principali molecole oggetto di studio saranno sostanze ormonali la cui importanza nelle relazioni radice-parte aerea è conclamata (acido abscissico, acido salicilico e H2O2), e molecole volatili (isoprenoidi volatili e altre sostanze volatili, BVOC). 2. Studio sulla persistenza e localizzazione in planta del composto ethylenediurea (EDU), composto usato come agente protettivo della vegetazione nei confronti dei danni arrecati dallozono troposferico: La ricerca in oggetto ha lo scopo di studiare il meccanismo dazione del composto EDU, frequentemente utilizzato per proteggere la vegetazione dai danni prodotti dallO3. 3. Ruolo delle forme reattive dellossigeno (ROS) e dellossido nitrico nel processo di allungamento del tubetto pollinico di Cupressus arizonica: La ricerca ha lo scopo di chiarire il ruolo delle ROS e di NO sullallungamento del tubetto pollinico di cipresso. Si misurerà la vitalità, la % di germinazione e la lunghezza del tubetto in presenza o in assenza di ROS e NO, utilizzando inibitori o scavengers. 4. Effetto degli inquinanti atmosferici e del particolato sullallergenicità del polline di cipresso: La ricerca ha lo scopo di studiare leventuale modificazione del rilascio dei due principali allergeni del polline di cipresso (Cupa1 e Cupa2), il rilascio di ROS e di quantificare lattività delle NAD(P)H ossidasi, in pollini prelevate da stazioni ad elevato inquinamento da traffico autoveicolare e in pollini controllo prelevate in area rurale. 5. Analisi del grado di piccantezza di differenti cultivar di peperoncino attraverso la quantificazioni degli alcaloidi capsaicina e diidrocapsaicina.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/335
Responsabile scientifico/Coordinatore	PASQUALINI Stefania (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
LS1_2 - General biochemistry and metabolism
LS3_7 - Cell signalling and cellular interactions
LS7_10 - Environment and health risks, occupational medicine
LS9_5 - Agriculture related to crop production, soil biology and cultivation, applied plant biology

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
EDERLI	Luisa	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	BIO/04

13. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Sintesi, proprietà e procedure chemoinformatiche per composti di interesse biologico e sistemi supramolecolari
Descrizione	Il gruppo si occupa di ricerca e applicazioni di procedure in silico e algoritmi chemioinformatici per risolvere problemi chimici complessi nel campo delle QSARs applicate alla ottimizzazione e alla ricerca di farmaci, allo studio del metabolismo umano, della tossicità, della chimica degli alimenti e dellambiente. Sintesi e applicazioni di nanomateriali per le biotecnologie mirati a razionalizzare i fenomeni che regolano il comportamento delle proteine (considerate come modelli di enzimi) allinterfaccia liquido-solido nel processo di adsorbimento su solidi nanostrutturati e nei processi catalitici. Applicazioni sintetiche di reazioni radicaliche mirate allo studio degli aspetti sintetici e meccanicistici delle reazioni di ossidazione chimica, elettrochimica e fotochimica con intermedi radicalici e particolare attenzione alla fotoossidazione sensibilizzata da TiO2 in fase liquida o gassosa. Sintesi di target fluoroorganici chirali di interesse farmacologico e agrochimico e loro determinazione strutturale tramite VCD e ECD con particolare attenzione alla sintesi di composti omo- ed eterociclici regio- e stereoselettivamente fluorati con attività biologica
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/68
Responsabile scientifico/Coordinatore	CRUCIANI Gabriele (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
LS1_1 - Molecular interactions
LS1_2 - General biochemistry and metabolism
LS2_4 - Metabolomics
LS7_3 - Pharmacology, pharmacogenomics, drug discovery and design, drug therapy
PE4_13 - Theoretical and computational chemistry
PE5_11 - Biological chemistry
PE5_16 - Supramolecular chemistry
PE5_18 - Molecular chemistry
PE6_12 - Scientific computing, simulation and modelling tools

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BOCCI	Giovanni	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
BUONERBA	Federica	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
CECCARELLI	Martina	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
CIPICIANI	Antonio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/06
CAROSATI	Emanuele	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/06
GORACCI	Laura	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ric. a tempo determ.	CHIM/06
ROL	Cesare	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/06
RUZZICONI	Renzo	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Ordinario	CHIM/06
SALUTI	Giorgio	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
TORTORELLA	Sara	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/06
VALERI	Aurora	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Assegnista	CHIM/06

---

14. Scheda inserita da questa Struttura ("CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE"):

Nome gruppo*	Chimica Inorganica Teorica e Computazionale
Descrizione	1) Sviluppo teorico-computazionale per lo studio di effetti relativistici in chimica: la ricerca è incentrata sullo sviluppo teorico e computazionale di metodi accurati, basati sui principi primi, per lo studio e la caratterizzazione della struttura elettronica in sistemi molecolari contenenti atomi pesanti. Al fine di ottenere modelli accurati per la descrizione della struttura elettronica di questi sistemi, si devono adottare i metodi della meccanica quantistica relativistica basati sull'equazione di Dirac. La combinazione della teoria di Dirac con quella del funzionale della densità (DFT) permette di incorporare in maniera efficiente anche la descrizione degli effetti della correlazione elettronica. Questo costituisce lessenza del metodo Dirac-Kohn-Sham (DKS) a quattro componenti ("fully relativistic"). Lo sviluppo di diversi schemi di parallelizzazione, implementando funzionali di scambio e correlazione in modo efficiente ed introducendo nuovi algoritmi, quali ad esempio quelli basati sul density fitting e Poisson density fitting permettono di ridurre enormemente il peso computazionale del metodo DKS. In questo modo lapproccio DFT relativistico a 4 componenti viene reso estremamente efficiente aprendo nuove prospettive di sviluppo. 2) Studio della natura del legame in complessi molecolari debolmente legati contenenti acqua e sistemi alogenati. Viene studiata in dettaglio la natura dell'interazione tra la molecola d'acqua e la serie dei gas nobili, oltre ad altre piccole molecole quali ad esempio H2, N2, etc. La caratterizzazione dell'interazione intermolecolare è effettuata sulla base di calcoli ab-initio della superficie di energia potenziale mediante la teoria Coupled Cluster. 3) Studio teorico e computazionale del legame chimico, struttura e meccanismi di reazione in complessi [L-Au(I)-S]X (S=substrato, X=controione) come catalizzatori di reazioni di addizione nucleofilica a legami multipli C-C. Ruolo del legante, del controione e/o del solvente nei meccanismi di reazione. La ricerca riguarda l' applicazione di metodi della chimica teorica considerati stato dell'arte per quanto riguarda l'analisi del legame chimico al fine di comprendere la natura del legame Au-C e come questa venga modificata dalla presenza del legante L e da una modifica delle proprieta' elettroniche di quest'ultimo nei sistemi catalitici [L-Au-S]X. Sulla base del confronto dei risultati ottenuti teoricamente e quelli ottenuti dall' esperimento si vuole razionalizzare, a fini predittivi, le strutture di coppia ionica osservate. Il ruolo del solvente nei meccanismi di reazione viene investigato mediante l'applicazione di metodi di dinamica di questi sistemi in soluzione.

	4) Modellizzazione e simulazione teorica delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche di nanostrutture di TiO2 per applicazioni in fotocatalisi e fotovoltaico La ricerca riguarda calcoli teorici utili nella progettazione di nuove nanostrutture estese di TiO2 con proprietà strutturali ed elettroniche ottimizzate, in modo da indicare in maniera predittiva quali rispondano ai requisiti necessari per applicazioni in DSC. Le indagini teoriche prevedono: 1) lottimizzazione di una procedura computazionale integrata basata sulla teoria DFT, sulla sua estensione dipendente dal tempo (TDDFT) e su simulazioni di dinamica molecolare Car-Parrinello, includendo gli effetti di solvatazione; 2) la modellizzazione e la simulazione teorica delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche di nanostrutture di TiO2 nella forma di nanotubi e di nanoparticelle di varia forma e dimensione; 3) la comprensione dei fattori elettronici che regolano il processo di separazione di carica elettrone-lacuna, il processo di trasporto e il processo di ricombinazione di carica attraverso le nanoparticelle di TiO2.
Sito web	http://www.chm.unipg.it/node/91
Responsabile scientifico/Coordinatore	TARANTELLI Francesco (CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE)

Settore ERC del gruppo:
PE3_4 - Electronic properties of materials surfaces, interfaces, nanostructures
PE4_1 - Physical chemistry
PE4_13 - Theoretical and computational chemistry
PE4_6 - Chemical physics
PE5_13 - Homogeneous catalysis
PE5_6 - New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles
PE6_2 - Computer systems, parallel/distributed systems,sensor networks, embedded systems, cyber physical system

Componenti:

Cognome	Nome	Struttura	Qualifica	Settore
BELANZONI	Paola	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Prof. Associato	CHIM/03
BISTONI	Giovanni	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
GAGGIOLI	Carlo Alberto	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
MAROTTA	Gabriele	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03
NUNZI	Francesca	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Ricercatore	CHIM/03
RONCA	Enrico	CHIMICA, BIOLOGIA E BIOTECNOLOGIE	Dottorando	CHIM/03