



La **Chimica e Industria** online

 **Organo Ufficiale della Società Chimica Italiana**



SCI 2024
Chimica
ELEMENTI DI FUTURO

 **Società
Chimica
Italiana**

XXVIII Congresso
Nazionale
MILANO, 26 - 30 Agosto 2024

ISSN 2283-544X

**Le sessioni tematiche di SCI 2024
per una chimica interdisciplinare**



#TeamUpToImprove

Il miglioramento dei processi è come il tandem.
Con il partner giusto tutto funziona in modo più efficiente.

L'ottimizzazione energetica è la chiave per una produzione sostenibile. In qualità di partner esperto ti aiutiamo a far fronte all'aumento dei costi energetici e agli obiettivi ambientali più complessi. Siamo al tuo fianco per scoprire le modalità di risparmio e di impiego delle risorse, mantenendo la sicurezza, la qualità, l'affidabilità e i tempi operativi.



Vuoi saperne di più?
www.it.endress.com

Endress+Hauser 

People for Process Automation



UNA SCIENZA SENZA DIVISIONI: LE CONTAMINAZIONI CULTURALI E IL PROGREGGIO DELLA CHIMICA

Le classificazioni disciplinari e le barriere settoriali sono categorizzazioni che poco hanno a che fare con le modalità dello sviluppo scientifico. Sono dei “fermo-immagine” dell’evoluzione della conoscenza che restano validi per brevi periodi e finiscono presto per diventare recinti in cui un ricercatore, un professionista o un insegnante difficilmente si riconoscono in pieno. Per loro stessa natura, la conoscenza e il progresso fioriscono dalla contaminazione di concetti e visioni, dalla capacità di abbandonare gli schemi incrementali per avventurarsi con coraggio e creatività in terreni poco consueti.

Questo è particolarmente vero per la chimica: il suo stesso carattere di linguaggio universale, a ponte tra i fondamenti scientifici e le sfide tecnologiche, rende innaturale ogni tentativo di ingabbiarla in schemi rigidi.

Proviamo allora ad organizzare le nostre discussioni intorno ad alcuni temi attuali della chimica contemporanea: invitiamo studiosi, industriali, professionisti, insegnanti, studenti, con diversa prospettiva e diversa estrazione culturale; organizziamo su queste tematiche tavole rotonde, conferenze, persino dimostrazioni. Facciamone un *forum* di riflessione sul contributo della chimica alle grandi sfide, non solo quelle tecnologiche, ma anche didattiche e culturali: benvenuti al giorno 3 del Congresso SCI 2024, benvenuti alle sessioni parallele tematiche; benvenuti a guardare al futuro con gli occhi della chimica.

Quindici sessioni per interrogarci sul ruolo della chimica e raccontare alla società dove la chimica può agire: 1. *Advanced monitoring, imaging and sensing*; 2. *Environmental protection*; 3. *Clean energy*; 4. *Health*; 5. *Cultural heritage*; 6. *Industry and technology transfer*; 7. *Catalysis*; 8. *Chemical education, communication and outreach*; 9. *Artificial intelligence and modelling*; 10. *Green chemistry for the circular*

economy; 11. *Inclusion, equity, diversity, and ethics*; 12. *Chemistry at the life science interface*; 13. *Smart materials*; 14. *Food*; 15. *New Reactions*.

In questi *forum* la Società Chimica Italiana esprime la sua natura al grado più elevato: una comunità che si interroga sulle vere questioni aperte, assume consapevolezza e responsabilità della sua missione, spinge lo sguardo oltre. Le sessioni tematiche sono al cuore del messaggio del XXVIII Congresso Nazionale SCI 2024. Hanno contribuito a farci sentire comunità unitaria e aiutato a conoscerci un po’ meglio, trasversalmente alle Divisioni, con un grande contributo dei Gruppi interdivisionali, che sono i vitali punti di confluenza.

Le Divisioni sono i nostri preziosi ambiti disciplinari, comunità scientifiche omogenee con illustri storie culturali, consuetudine di ricerca e di rapporti; sono, insieme alle Sezioni territoriali, i pilastri stessi della Società Chimica Italiana.

Divagando col pensiero ad un futuro possibile per la nostra Società, mi sono a volte soffermato a riflettere sul chiamarle “Divisioni”... una sfumatura semantica che evoca recinti, confini e barriere. E così, speculando, ho immaginato altre parole: Ambiti, Unità, Aree... Più di tutte mi piace quest’ultima: Area. Area evoca spazi non confinati, che possono sovrapporsi e svilupparsi, evolvere ed integrarsi.

Ma non voglio spaventare con le mie digressioni lessicali. Sono solo riflessioni, condivise con i lettori di questo editoriale. Forse, le si guarderà in futuro. Le nostre sessioni tematiche sono state un utile esercizio in questa direzione. Il ringraziamento va ai Comitati Scientifici che le hanno organizzate, formati dai delegati delle Divisioni e dei Gruppi Interdivisionali, per averle concepite e strutturate con tanta creatività e profondità di contenuti.



**Società
Chimica
Italiana**



EDITORIALE

- 3 UNA SCIENZA SENZA DIVISIONI: LE CONTAMINAZIONI CULTURALI E IL PROGRESSO DELLA CHIMICA**
Gianluca Maria Farinola

FOCUS SULL'INDUSTRIA CHIMICA

- 7 MESSAGGI DI FEDERCHIMICA AI CHIMICI SU ALCUNI ASPETTI DELL'INDUSTRIA CHIMICA ITALIANA**
Ferruccio Trifirò

ATTUALITÀ

- 10 PROGETTARE LE PROTEINE: LA RIVOLUZIONE COMPUTAZIONALE**
Alice Triveri, Marco De Vivo
- 16 LA PAROLA "FINE" SULLA PETROLCHIMICA ITALIANA**
Carlo Perego

SCI 2024

- 18 ADVANCED MONITORING, SENSING AND IMAGING**
Andrew Smith, Dario Compagnone
- 22 ENVIRONMENTAL PROTECTION**
Antonio Marcomini, Concetta De Stefano
- 26 CHIMICA E MEDICINA DI PRECISIONE IN ITALIA**
Maria Laura Bolognesi, Paolo Caliceti
- 32 LA CHIMICA PER IL PATRIMONIO CULTURALE**
Elisabetta Zendri
- 36 INDUSTRY & TECHNOLOGY TRANSFER**
Vincenzina Barbera, Maurizio Galimberti, Mario Marchionna, Paolo Vacca
- 42 CATALISI**
Michela Signoretto, Paolo Fornasiero, Rinaldo Psaro

46 INSEGNARE, APPRENDERE E COMUNICARE LA CHIMICA

Ugo Cosentino, Mariano Venanzi

51 ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND MODELING FOR CHEMISTRY

Piero Ugliengo, Claudio Greco, Marco De Vivo

56 INCLUSION, EQUITY, DIVERSITY AND ETHICS

Marta Da Pian, Alessandro Minguzzi

60 SMART MATERIALS

Sabrina Antonello, Francesca D'Anna, Maria Valeria D'Auria

64 FOOD

Paola Montoro, Nadia Mulinacci

68 LA SILENT ROOM

Alessandro Minguzzi, Emanuela Licandro, Mariaroberta Tersigni, Paola Fermo, Luigi Falciola

CHIMICA & AMBIENTE

72 LA MECCANICA QUANTISTICA E IL RISCALDAMENTO GLOBALE

Claudio Della Volpe

78 RECENSIONI LIBRI

DALLA LETTERATURA

- 82** a cura di Silvia Cauteruccio e Monica Civera

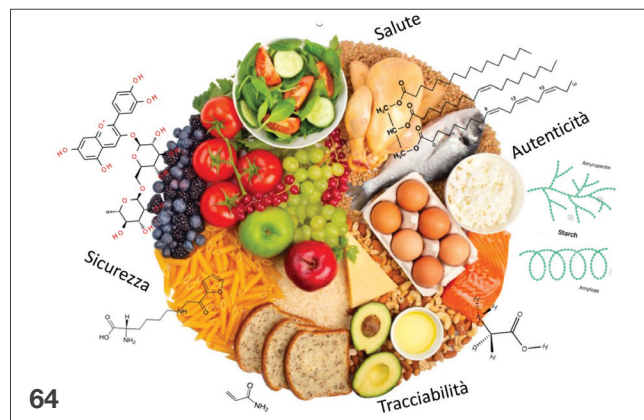
AIDIC

84 RIGENCAP: I FILTRI DA CUCINA RIGENERABILI

Giulia Tonsi, Giammarco Callea, Mariangela Longhi, Carlo Pirola



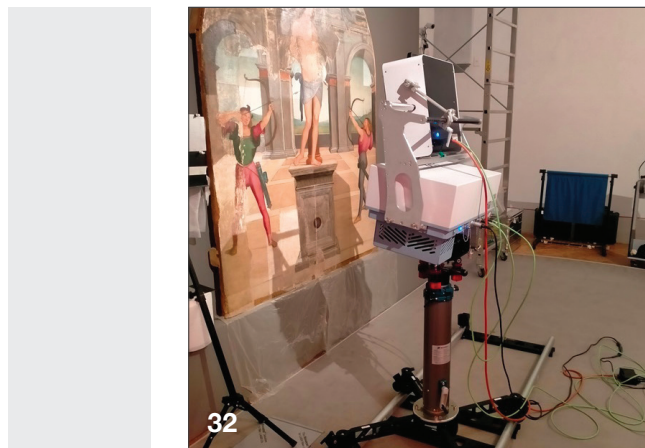
16



64



84



32



la Chimica e l'Industria online
 Organo Ufficiale della Società Chimica Italiana

DIRETTORE RESPONSABILE

Matteo Guidotti

VICE-DIRETTORE

Mario Marchionna

REDAZIONE SCIENTIFICA

Anna Simonini
 Piazzale R. Morandi, 2 - 20121 Milano - tel. +39 345 0478088
 anna.simonini@soc.chim.it

COMITATO DI REDAZIONE

Catia Arbizzani, Tiziano Bandiera, Silvia Bordiga, Franco Calascibetta,
 Martino Di Serio, Matteo Guidotti, Mario Marchionna,
 Carmela Maria Montone, Oreste Piccolo, Anna Simonini,
 Adalgisa Sinicropi, Ferruccio Trifirò

COMITATO SCIENTIFICO

Alessandro Abbotto, Eleonora Aquilini, Giuliana Bianco,
 Maria Laura Bolognesi, Luigi Campanella, Sergio Carrà,
 Mario Chiesa, Silvia Colombo, Claudio Greco, Gaetano Guerra,
 Alessandra Magistrato, Piero Mastroianni,
 Moreno Meneghetti, Paola Minghetti, Luigi Mondello,
 Nadia Mulinacci, Antonio Proto, Monica Santamaria, Raffaele Riccio

DIRETTORE ONORARIO

Ferruccio Trifirò

HANNO COLLABORATO

Claudio Della Volpe,
 Silvia Cauteruccio, Monica Civera

PROGETTO GRAFICO E IMPAGINAZIONE

Sara Moscardini

CONCESSIONARIA DI PUBBLICITÀ

Agicom Srl
 Viale Caduti in Guerra, 28 - Castelnuovo di Porto (Roma)
 Tel. +39 06 9078285, fax +39 06 9079256
 domenicacipriani@agicom.it
 Skype: agicom.advertising

EDITORE

PAS-SCI Srl
 Roma

Reg. Tribunale di Milano n. 134 del 11/04/2017

ISSN 2283-544X

http://www.soc.chim.it/riviste/chimica_industria/catalogo

COSTRUIAMO UN PRESENTE PENSATO PER AVERE FUTURO



Passione, spirito di squadra e uno sguardo sempre rivolto al futuro. Mapei contribuisce alle più importanti opere architettoniche e infrastrutturali, ai progetti in ambito residenziale, al restauro di edifici storici a livello globale. Nel segno dell'innovazione, ci impegniamo ogni giorno per un'edilizia sempre più sostenibile.

È TUTTO OK,
CON MAPEI

Scopri di più su mapei.it

 **MAPEI**[®]

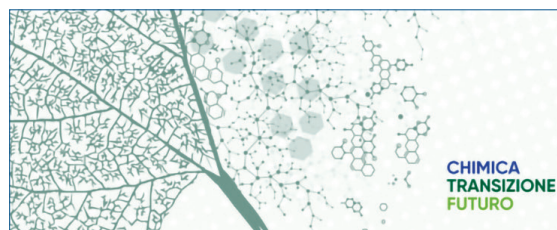


Ferruccio Trifirò
Professore Emerito Università di Bologna
ferruccio.trifiro@unibo.it

MESSAGGI DI FEDERCHIMICA AI CHIMICI SU ALCUNI ASPETTI DELL'INDUSTRIA CHIMICA ITALIANA



In questa nota sono riportati alcuni titoli e cenni sul contenuto dei diversi paragrafi del rapporto di Federchimica 2023-2024 (L'industria chimica in Italia, rapporto 2023-2024), pubblicato lo scorso novembre. L'obiettivo è inviare messaggi ai chimici riguardo al ruolo dell'industria chimica in Italia. In questo numero della rivista, è importante ricordare le seguenti collaborazioni di Federchimica con la Società Chimica Italiana (SCI): il Premio Nazionale Giovani, dedicato alla chimica di base e alla chimica delle plastiche, la partecipazione ai "Giochi della Chimica" organizzati dalla SCI e la collaborazione nell'organizzazione del Convegno SCI 2024 a Milano.



L'INDUSTRIA CHIMICA IN ITALIA RAPPORTO 2023 - 2024

Chimica, transizione, futuro

Il termine "sostenibilità" definisce la condizione di sviluppo che assicura il soddisfacimento dei bisogni della generazione presente, senza compromettere la possibilità di soddisfare quelli delle generazioni future. Un futuro senza chimica, o anche solo con meno chimica, sarà certamente un futuro peggiore: queste sono le parole chiave della comunicazione da ribadire anche in ambito istituzionale e nei contesti di dibattito pubblico, affinché il settore si approprii pienamente del ruolo fondamentale che gli compete.

Lo scenario economico

L'Italia è un Paese con una forte vocazione industriale e la chimica, con un valore della produzione superiore a 67 miliardi di euro nel 2023, rappresenta la quinta industria del Paese (dopo metallurgia, alimentare, meccanica, auto e componentistica). Le imprese chimiche attive sul territorio nazionale sono oltre 2.800 e, con 3.700 insediamenti, occupano quasi 113.000 addetti altamente qualificati. L'industria chimica in Italia è il terzo produttore europeo (dopo

Germania e Francia) e, per diverse produzioni di chimica fine e specialistica, occupa posizioni anche più rilevanti. In alcuni settori, come la produzione di principi attivi farmaceutici, vanta una leadership a livello mondiale. La specializzazione italiana nella chimica delle specialità e dei consumi (che copre il 57% della produzione settoriale rispetto al 37% dell'UE) aiuta a spiegare la tenuta della produzione di fronte alla crisi energetica.

Alimentare il dialogo Scuola-Industria per orientare in modo efficace i giovani

Federchimica ha intrapreso diverse iniziative per orientare i giovani verso la scienza e i percorsi di studio tecnico-scientifici. Per i ragazzi più giovani, in particolare nelle scuole secondarie di primo grado, è stato creato il "Premio Nazionale Federchimica Giovani". Per gli studenti più grandi, in collaborazione con le Università, sono stati sviluppati progetti come "PCTO Costruirsi un futuro nell'industria chimica", per orientare verso percorsi di studio in materie chimiche e per valorizzare gli ITS Academy e



le opportunità di lavoro nelle imprese. Inoltre, per gli studenti universitari, Federchimica promuove attività per consolidare percorsi di studio funzionali a un efficace inserimento nel settore chimico. Per contrastare la diminuzione del numero di periti chimici, nel 2024 è stata creata la “Chemistry Network”, una rete nazionale di Istituti Tecnici ad indirizzo “Chimica e Materiali”, con l’obiettivo di migliorare l’orientamento verso l’istruzione tecnica secondaria, rafforzare il confronto tra mondo educativo e mondo del lavoro, e favorire le iscrizioni universitarie in ambito chimico.

Sicurezza prodotti

Il processo di restrizione del Regolamento REACH coinvolge un numero crescente di aziende. Le restrizioni ora riguardano gruppi di sostanze, non solo singole sostanze, rendendo più complessi sia l’iter di proposta che l’attuazione delle restrizioni. Le industrie chimiche sono soggette anche ad altri regolamenti, tra cui: il CLP (sulla classificazione, l’etichettatura e l’imballaggio), quelli relativi ai materiali a contatto con alimenti e acque potabili, al Dual Use (prodotti utilizzati per applicazioni civili e militari), ai Precursori di droghe e ai Precursori di esplosivi. La chimica è uno strumento indispensabile nel perseguimento della sostenibilità, sia per le imprese del settore, sia per i settori a valle.

Sostenibilità ed economia circolare

Il 13 giugno 2024 è stato pubblicato sulla Gazzetta Ufficiale dell’Unione Europea il Regolamento (UE) 2024/1781, denominato “Ecodesign Sustainable Product Regulation” (ESPR), che definisce un quadro per la progettazione ecocompatibile dei prodotti, al fine di migliorarne la sostenibilità ambientale e ridurre l’impronta di carbonio e ambientale durante l’intero ciclo di vita. L’obiettivo è fare in modo che i prodotti sostenibili diventino la norma, garantendone la libera circolazione nel mercato interno. Il Re-

golamento ESPR si applica a qualsiasi bene fisico immesso sul mercato o messo in servizio, inclusi i componenti e i prodotti intermedi, ad eccezione di alcuni esclusi, come alimenti, mangimi, medicinali, piante, animali e microrganismi vivi, prodotti di origine umana, vegetale e animale, e veicoli per i quali esistono già requisiti europei specifici.

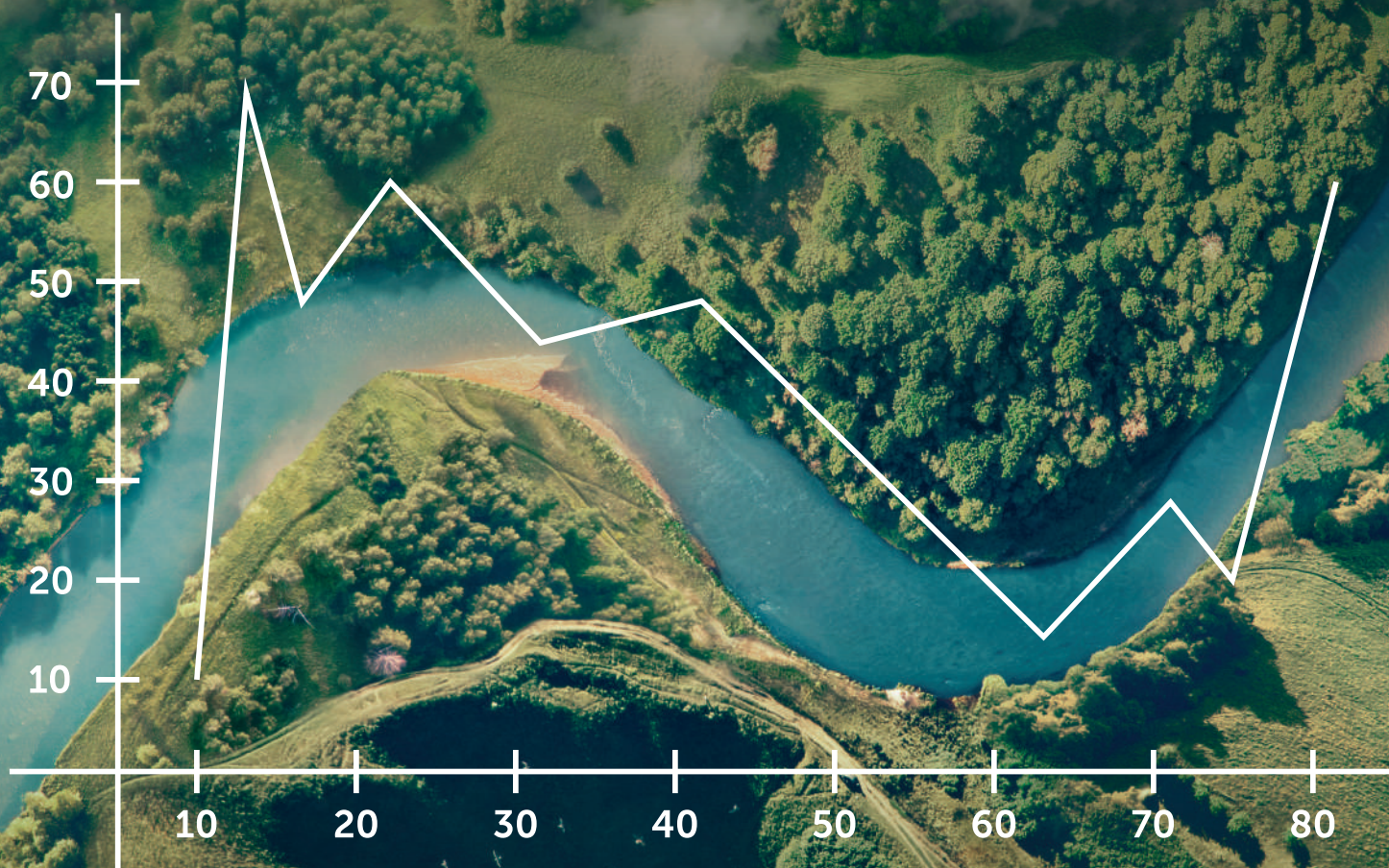
Ricerca ed innovazione

L’incremento degli investimenti nella ricerca, in tutti i settori, è essenziale per sviluppare soluzioni innovative che migliorino le condizioni di vita delle persone e aumentino la competitività e la produttività delle imprese, garantendo il benessere economico e sociale. Queste esigenze riguardano non solo l’innovazione nella chimica, ma anche dei molti settori ad essa collegati. Le imprese chimiche necessitano di supporto, non solo economico, dalle Istituzioni. L’elevato contenuto scientifico e tecnologico dei prodotti chimici richiede competenze e conoscenze spesso non disponibili internamente, rendendo indispensabile il coinvolgimento di attori esterni, come Università e Centri di Ricerca. Un ambito in cui la ricerca collaborativa, il trasferimento tecnologico, la condivisione di *know-how* tra impresa e ricerca pubblica e gli investimenti in partnership pubblico-private sono fondamentali, è quello dei materiali avanzati e delle tecnologie abilitanti strategiche, che sono essenziali per la competitività industriale e per raggiungere l’autonomia tecnologica.

I diversi settori dell’industria chimica

Si ricorda che Federchimica rappresenta i seguenti 17 settori industriali e 38 gruppi merceologici: Chimica Organica e Inorganica di base e Tensioattivi; Materie plastiche e Resine sintetiche; Chimica da biomassa; Fertilizzanti; Agrofarmaci; Fibre artificiali e Sintetiche; Additivi, Ausiliari, Chimica fine e Specialità per l’industria; Chimica per il settore alimentare; Oli lubrificanti; Abrasivi; Smalti per ceramica, Pigmenti inorganici ed Ossidi metallici; Adesivi e Sigillanti, Pitture e Vernici; Inchiostri da stampa; Gas tecnici speciali e Medicinali; Additivi ed Ausiliari per la Detergenza e Tensioattivi; Detergenti e Specialità per l’Industria e per la Casa; Ingredienti Cosmetici, Additivi farmaceutici e Fragranze; Cosmetica; Principi attivi di Chimica farmaceutica; Farmaci di automedicazione; Prodotti per la salute animale; Biotecnologie; Prodotti aerosol; Gas liquefatti; Servizi all’industria chimica.

Misuriamo e certifichiamo l'acqua da remoto e in tempo reale.



Abbiamo brevettato un metodo per la gestione di analizzatori in continuo sugli impianti e il controllo del relativo flusso di dati certificabili.

Un processo che unisce ai benefici delle procedure di un laboratorio accreditato il miglioramento dei tempi di analisi e la disponibilità in tempo reale di dati affidabili e precisi.

Scopri di più su gruppohera.it/laboratori



gruppohera.it

GRUPPO
HERA

PROGETTARE LE PROTEINE: LA RIVOLUZIONE COMPUTAZIONALE

Il premio Nobel per la Chimica del 2024 è stato assegnato a David Baker, Demis Hassabis e John Jumper per il loro lavoro trasformativo nella previsione e nella progettazione della struttura proteica. I software Rosetta di Baker e AlphaFold2 di DeepMind hanno rivoluzionato il campo, consentendo previsioni strutturali accurate da sequenze di amminoacidi. Questa sinergia tra intelligenza artificiale e biologia computazionale apre nuove strade per la progettazione di nuove proteine, con implicazioni significative in medicina e biotecnologia.

Il Premio Nobel per la Chimica 2024 celebra le proteine, molecole fondamentali della vita. Vincitore è David Baker dell'Università di Washington (Seattle, USA), per l'uso del computer nella progettazione di nuove proteine, unitamente a Demis Hassabis e John M. Jumper di Google DeepMind, per l'uso dell'intelligenza artificiale nella modellazione delle loro strutture (Fig. 1).

Le proteine: molecole essenziali per la vita

Le proteine sono molecole indispensabili per una vasta gamma di processi biologici essenziali del nostro corpo, dal supporto strutturale delle cellule ad un esteso repertorio di vitali reazioni biochimiche. Queste attività fondamentali sono intrinsecamente connesse alla forma tridimensionale specifica di ogni proteina che, a sua volta, è determinata dalla sua esatta composizione, ovvero da numero, tipo e sequenza di amminoacidi che la costituiscono [1, 2]. È quindi la specifica sequenza degli amminoacidi a determinare la struttura tridimensionale (3D) della proteina nello spazio e quest'ultima, a sua volta, a conferirle la sua funzione specifica [3]. Detta struttura 3D si organizza in elementi distintivi chiamati alfa eliche, foglietti beta e loops. Il ripiegamento 3D finale è, dunque, il risultato dell'interazione tra tutti gli amminoacidi della proteina, i quali si dispongono nello spazio in una configurazione ottimale ed unica. Se la forma viene alterata, per esempio a causa di mutazioni genetiche

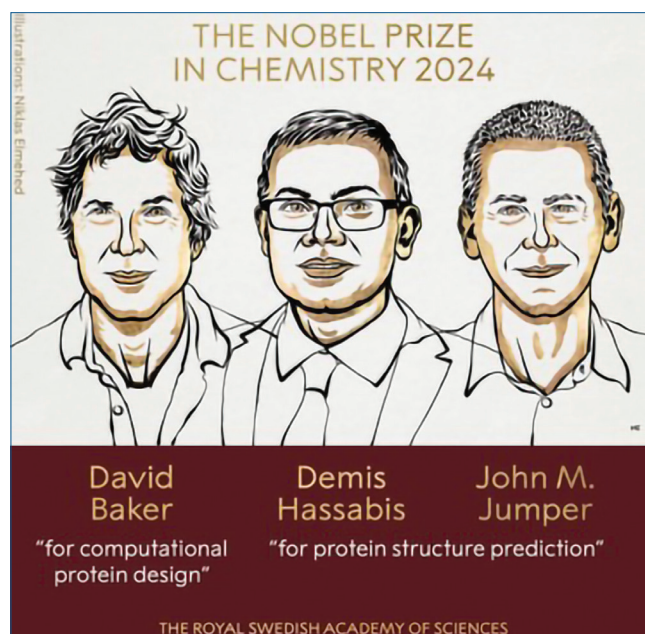


Fig. 1 - I vincitori del premio Nobel per la Chimica 2024: David Baker per la progettazione computazionale della struttura tridimensionale delle proteine e Demis Hassabis e John M. Jumper per la previsione della struttura tridimensionale delle proteine

di amminoacidi di una proteina, anche la sua funzione può risultare compromessa [4, 5]. Questa è, infatti, la causa di molte malattie in cui alterazioni strutturali delle proteine, provocate spesso da mutazioni genetiche della loro composizione amminoacidica, portano ad un malfunzionamento cellulare [3].



Fig. 2 - Dalla sequenza di amminoacidi primaria fino ad arrivare alla struttura tridimensionale di una proteina composta da diverse strutture secondarie

Quindi la forma 3D di ogni proteina è la chiave per la sua funzione: ogni proteina è un “oggetto” unico, che ha una sua specifica struttura 3D ed una sua dinamica nello spazio che le permette di eseguire precisi ed essenziali funzioni per la vita cellulare. La forma è, dunque, sostanza (Fig. 2).

La sfida: comprendere per progettare

Decifrare e modellare la struttura 3D delle proteine ha immense implicazioni in scienza, medicina e tecnologia. Questo spiega la lunga corsa scientifica degli ultimi cinquant'anni che, nel tentativo di progettare e regolarne la funzione, ha aperto la strada ad innovazioni rivoluzionarie in numerosi campi.

Per risalire alla struttura di una proteina, i ricercatori spesso utilizzano diverse tecniche sperimentali avanzate che permettono di “risolvere” (*i.e.*, vedere) questa forma con grande precisione, o “risoluzione”, nel senso di osservare finemente la disposizione dei singoli atomi di ogni amminoacido. Sviluppare tecniche sempre più avanzate è fondamentale quindi per decifrare come la struttura di una proteina contribuisca alla sua funzione. Sebbene l'importanza delle proteine in biologia sia nota fin dal diciannovesimo secolo, è stato solo dalla metà del Novecento che i progressi della biochimica e della biologia molecolare hanno consentito di analizzarne la struttura in modo dettagliato, aprendo la strada alle moderne applicazioni nel campo del design proteico.

La prima tecnologia per scoprire la struttura tridimensionale delle proteine è conosciuta come cristallografia a raggi X [1, 2], fruttata il premio Nobel per la Chimica del 1962 a John Kendrew e Max Perutz. Ed è proprio grazie a questa tecnica che il premio Nobel per la Chimica del 1972 Christian Anfinsen ha fatto la sua grande scoperta: se si osserva dispiegare una proteina dal suo stato 3D riportandola ad una sem-

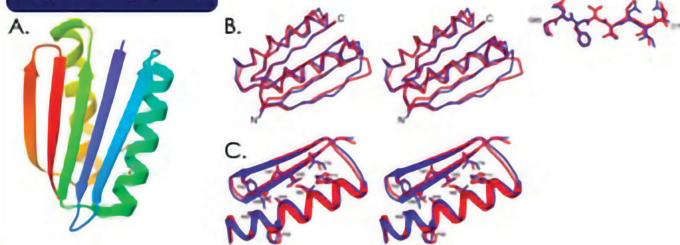
plice catena lineare di amminoacidi e la si lascia poi libera di adottare una forma qualsiasi, questa catena lineare di amminoacidi torna a ripiegarsi esattamente nella stessa struttura 3D che aveva in origine. Un po' come sciogliere un gomitolo di lana, rendendolo un filo lineare e vedere che, al rilascio, esso torna spontaneamente a formare l'esatto gomitolo di partenza. Un fenomeno affascinante che dimostrò, quindi, che la struttura 3D di ogni proteina dipende unicamente dalla sequenza di amminoacidi che la compone [3]. Si aprì così quella che un altro premio Nobel per la Chimica (tanta densità di Nobel riflette l'importanza di questo campo di studi) - l'esperto di ribosomi Venkatraman Ramakrishnan - ha definito “*la grande sfida cinquantennale della biologia*”: scoprire come determinare la struttura che assumerà una proteina, a partire dalla sequenza di amminoacidi da cui è composta.

La cristallografia a raggi X per determinare la struttura 3D delle proteine è una tecnica di analisi molto precisa e tuttora utilissima, ma presenta alcuni svantaggi: è lenta, costosa e non applicabile a tutte le proteine. Basti pensare che, delle oltre 200 milioni di proteine con sequenze di amminoacidi note, è stata determinata la struttura 3D attraverso la cristallografia di solo circa 200 mila (0,1%). Ne deriva quindi che la capacità di prevedere la struttura di una proteina a partire semplicemente dalla sua composizione di amminoacidi, ovvero senza l'uso della cristallografia a raggi X ma attraverso l'uso della modellistica computazionale, comporterebbe quindi un enorme vantaggio per la ricerca scientifica. Proprio per questo, nel 1994 è stato avviato il progetto “Critical Assessment of Protein Structure Prediction” (CASP) (<https://prediction-center.org/>) che si è trasformato in una competizione scientifica biennale. Da allora, gruppi di ricerca da tutto il mondo si sono affrontati nel tentativo di prevedere-

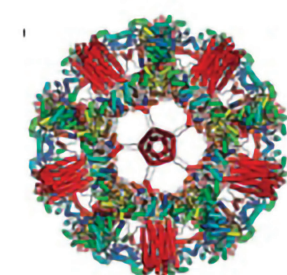
David Baker e il software ROSETTA

Il mondo della **progettazione** computazionale di nuove proteine

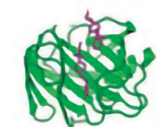
Top7: la prima



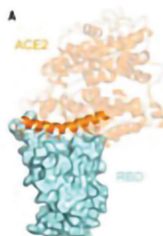
Negli anni



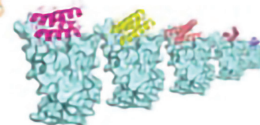
2016: nuovi nanomateriali (Nature **2016**)



2017: sensori ambientali per il potente oppioide fentanil. (eLife **2017**)



2020: miniproteine inibitrici di SARS-CoV-2. (Science **2020**)



2022: macchine molecolari. (Science **2022**)

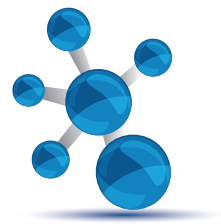
Fig. 3 -A) Struttura cristallina di Top7; B, C) confronto tra il modello computazionale progettato (blu) con il software Rosetta e la struttura a raggi X risolta (rosso) di Top7. Proteine progettate da Rosetta nel corso degli anni, tra cui la creazione di nuovi materiali, sensori, vaccini e macchine molecolari

re con l'uso di tecniche computazionali la struttura 3D di proteine senza conoscerne la vera struttura sperimentale, già risolta ma tenuta segreta solo per poi verificare l'accuratezza del modello proposto.

David Baker ha partecipato a questa competizione sin dalla sua prima edizione. Grazie all'approccio innovativo del suo team, composto da esperti di biochimica e biologia computazionale, Baker ha apportato un contributo decisivo alla modellazione della struttura della proteina attraverso l'ideazione, alla fine degli anni Novanta, del software *Rosetta*, auspicandone evidentemente la stessa abilità di decodifica consentita dalla celebre Stele [6] (Fig. 3). Questo approccio ha permesso di ottenere previsioni sempre più accurate negli anni, aprendo nuove strade nella comprensione delle strutture proteiche. I risultati ottenuti hanno anche messo in luce l'importanza della bioinformatica nel campo della biologia strutturale, dimostrando come la combinazione di analisi computazionali e dati sperimentali possa portare a scoperte significative nella scienza delle proteine. Il computer iniziò quindi ad essere usato come un acceleratore per lo studio della struttura di proteine.

David Baker: il Nobel e il futuro delle proteine

Il debutto di Baker al CASP, nel 1998, fu promettente e segnò l'inizio di un lungo percorso di ricerca scientifica. Baker e il suo gruppo ebbero infatti un'intuizione brillante: perché non invertire il processo di analisi? Invece che partire dalla sequenza di amminoacidi per prevedere la struttura 3D delle proteine, perché non utilizzare Rosetta per determinare la sequenza di amminoacidi necessaria ad ottenere una specifica struttura 3D? Questa idea aprì nuove prospettive, non solo per una comprensione più profonda della biologia delle proteine, ma anche per la progettazione di strutture 3D di proteine fatte su misura. Una sorta di alta sartoria per proteine, ottenute disegnando nuove strutture 3D e nuove funzioni per applicazioni in ambito medico e biotecnologico. Fu un passo fondamentale nel campo del *protein design*, ovvero la progettazione di proteine artificiali (*i.e.*, non presenti in natura) con funzioni inedite. Baker, con una metafora, spiegò l'importanza del suo approccio: "Se vuoi costruire un aeroplano, non inizi modificando un uccello, piuttosto cerchi di capire i principi dell'aerodinamica, e con questi costruisci una macchina volante". Ed



è esattamente ciò che Baker e il suo team dell'Università di Washington hanno fatto in questi decenni. Un esempio pionieristico di questo approccio è stato la progettazione della proteina *Top7*, ideata per assumere una struttura 3D completamente originale. Rosetta fu in grado di prevedere quale sequenza di amminoacidi sarebbe stata necessaria per realizzarla e, per farlo, analizzò un database contenente tutte le strutture proteiche conosciute fino a quel momento, identificando frammenti strutturali simili alla struttura 3D desiderata. Utilizzando le regole del ripiegamento delle proteine, Rosetta propose la sequenza di amminoacidi produttiva della struttura 3D desiderata. A questo punto a Baker non restava che realizzare in laboratorio la sequenza di amminoacidi, lasciare si ripiegasse nella propria struttura 3D e risolverne la struttura a raggi X per constatare che la proteina *Top7* presentava esattamente la struttura 3D desiderata e progettata al computer. Era il 2003, e *Top7* divenne così la prima proteina artificiale progettata al computer, con una struttura 3D mai vista in natura [7]. Era nato un nuovo approccio per fare *protein design* basato sulla computazione. Da allora, Baker ha creato molte altre proteine artificiali, tra cui miniproteine in grado di neutralizzare virus come il SARS-CoV-2 responsabile del COVID-19 [8], capaci di colpire le cellule cancerose, ed anche velocizzare (*i.e.*, catalizzare) complesse reazioni (bio)chimiche o assemblarsi in nuovi nanomateriali con proprietà inedite (Fig. 3). Utilizzando la progettazione computazionale di proteine, è oggi possibile creare molecole proteiche altamente specifiche, riducendo i costi e migliorando la stabilità e l'efficacia del processo di sviluppo di nuove tecnologie. Oggi, David Baker è un professore in diverse discipline scientifiche, ha pubblicato oltre 640 articoli di ricerca e più di 100 brevetti. È inoltre il fondatore della Institute for Protein Design (IPD), una struttura di ricerca presso l'Università di Washington (<https://www.ipd.uw.edu/>). L'IPD si concentra sulla progettazione di proteine innovative attraverso approcci computazionali avanzati, con l'obiettivo di sviluppare applicazioni in diversi settori, dalla medicina alla biotecnologia. Infine, è anche co-fondatore di 21 aziende biotecnologiche, tra cui Prospect Genomics, acquisita da una sussidiaria di Eli Lilly nel 2001, e Icosavax, che è stata acquisita da AstraZeneca nel 2023. Queste iniziative dimostrano il suo impegno a tradurre le scoperte scientifiche in applicazioni pratiche, contribuendo all'innovazione nel campo delle biotecnologie ([\[ipd.uw.edu/baker-technology-transfer-roles/\]\(https://www.ipd.uw.edu/baker-technology-transfer-roles/\)\). Una scienza, quella originata da Baker, che ha dimostrato il suo grande valore.](https://www.</p></div><div data-bbox=)

L'impatto dell'intelligenza artificiale in biologia strutturale

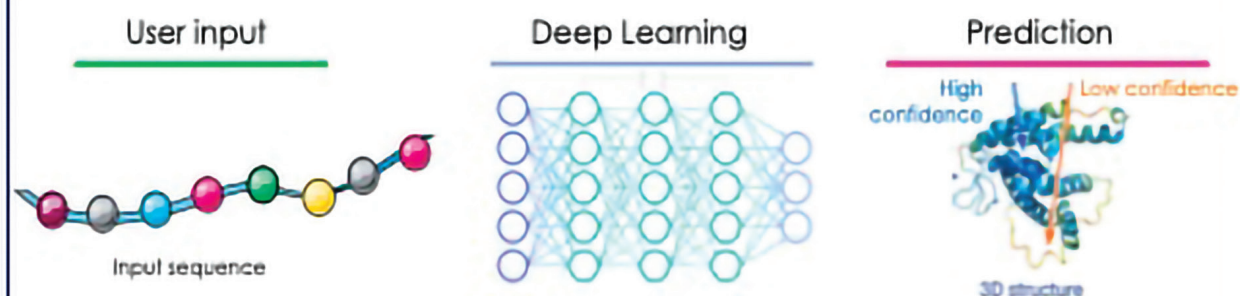
Per quasi vent'anni, la competizione CASP ha visto scarsi progressi, subendo una battuta d'arresto nel tentativo di prevedere le strutture proteiche. Questo quantomeno fino all'arrivo di AlphaFold, un modello di intelligenza artificiale (IA) sviluppato da Demis Hassabis, creatore di DeepMind, una società specializzata nello sviluppo di IA per videogiochi, acquistata da Google nel 2014 (<https://deepmind.google/technologies/alphafold/>). Hassabis è una figura eclettica, con un passato da prodigioso scacchista ed una vasta esperienza nello sviluppo di IA. Appassionato di sfide, scelse la previsione computazionale della struttura 3D delle proteine come il suo nuovo campo di prova. Così, arrivò il primo modello del software AlphaFold, che partecipò al CASP nel 2018, ottenendo un'accuratezza predittiva del 60%, molto superiore alla media della competizione che si attestava intorno al 40%. Questo risultato era, tuttavia, ancora inferiore all'obiettivo del 90% fissato dagli organizzatori. La storia si sarebbe potuta fermare lì, con un parziale successo di AlphaFold. Non fu così. Entrò in scena John Jumper, un giovane fisico appena dottorato in chimica con esperienza nel campo computazionale delle simulazioni di proteine. Jumper si unì a DeepMind nel 2017 e collaborò con Hassabis per sviluppare AlphaFold2, una seconda versione del software iniziale che fu migliorata grazie ad un utilizzo di IA che si basa sul *deep learning*, noto come "trasformatore", addestrato su un vasto dataset contenente tutte le strutture proteiche e le sequenze di amminoacidi conosciute. Quando AlphaFold2 partecipò al CASP nel 2020, segnò una svolta rivoluzionaria: era capace di prevedere la struttura delle proteine con una precisione paragonabile a quella della cristallografia a raggi X [9] (Fig. 4). Il risultato fu che, dopo oltre cinquant'anni, la sfida della previsione delle strutture proteiche era stata finalmente vinta grazie all'utilizzo di IA, accendendo di entusiasmo il mondo scientifico.

La storia di AlphaFold è, dunque, straordinaria ed è stata seguita nel 2021 da un'importante collaborazione tra DeepMind e l'European Molecular Biology Laboratory (EMBL) allo scopo di creare una banca dati pubblica contenente le strutture 3D - predette

Demis Hassabis e John M. Jumper e il software AlphaFold

IA per la predizione di strutture 3D

AlphaFold



Risultati

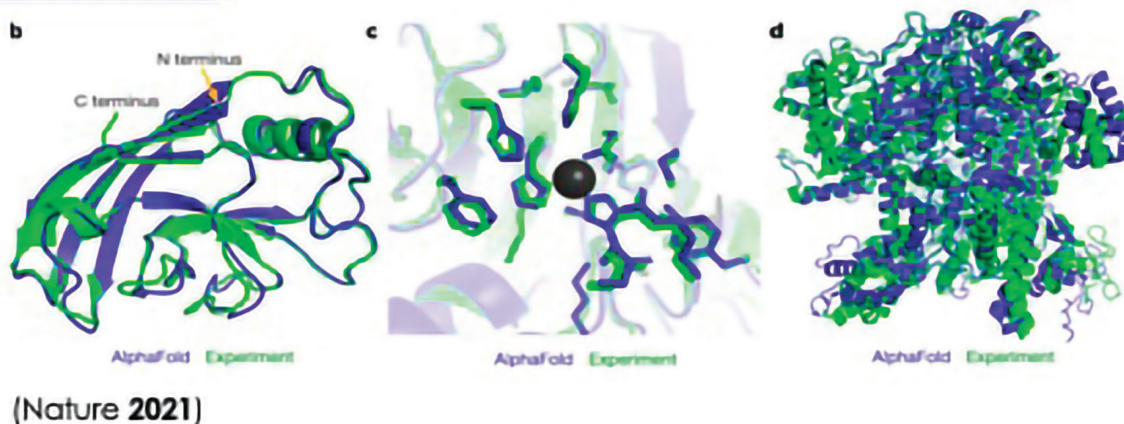


Fig. 4 - AlphaFold: dall'input dell'utente (la sequenza di amminoacidi), al metodo di apprendimento basato sul *deep learning* fino alla previsione della struttura 3D. Risultato: confronti tra modelli AlphaFold (blu) e strutture sperimentali risolte ai raggi X (verde)

da AlphaFold - per quasi tutte le proteine umane e per molte altre proteine di interesse biologico [10]. Questo database è diventato una risorsa preziosissima per la comunità scientifica globale. Inoltre, recentemente è stato riportato Alphafold3, una nuova versione che promette di prevedere la struttura non solo delle proteine ma anche di strutture 3D degli acidi nucleici, RNA e DNA [11], in tal modo elevando il livello di complessità della sfida vista la flessibilità tipica degli acidi nucleici. Prevedere le strutture 3D di RNA e DNA sarà un'ulteriore conferma delle potenzialità del computer e dell'IA in campo scientifico.

Computer, IA e dati sperimentali per un unico obiettivo

Sicuramente i vincitori del premio Nobel del 2024 sono accumulati dalla volontà di comprendere come le proteine formino la loro struttura 3D e come questa regoli la loro funzione. Tuttavia, ad unirli è anche l'impiego di computer, algoritmi, fisica e chimica applicati alla biologia, un approccio multidisciplinare che ha portato a risultati straordinari, evidenziando l'importanza di tecnologie come l'High Performance Computing (HPC) e l'intelligenza artificiale (IA) nel campo della biologia strutturale. L'uso di strumenti



avanzati ha reso possibile l'analisi di enormi quantità di dati: nel 2022 Alphafold2 ha modellato le strutture tridimensionali di oltre 200 milioni di proteine e, dalla sua pubblicazione nel 2021, è stato utilizzato da oltre due milioni di ricercatori di 190 Paesi nel mondo. Ha anche generato una nuova sfida in questo campo: infatti, nel 2022, il software Meta AI, rivale di AlphaFold, ha predetto la struttura di 600 milioni di proteine, spingendo il campo verso un rapido progresso attraverso l'utilizzo di strumenti computazionali che hanno non solo rivoluzionato la previsione delle strutture 3D di proteine, ma anche permesso di integrare dati sperimentali con modelli computazionali, rendendo il processo più efficiente.

Tuttavia, il successo così rapido di AlphaFold2, culminato nel Nobel dopo soli tre anni dalla sua pubblicazione nel 2021, è un caso quasi unico nella storia di questo riconoscimento, che spesso viene concesso solo dopo decenni di verifica dell'impatto scientifico della scoperta. Sarà interessante, dunque, negli anni futuri, verificare appieno l'impatto di questa tecnologia sulla ricerca scientifica e tecnologica. Un contributo, quello di Alphafold, riconosciuto rapidamente anche forse grazie all'entusiasmo diffuso per tutto ciò che riguarda attualmente la rivoluzione della IA ed all'attenzione al suo potenziale, che ha dimostrato di saper dare risposte rapide e spesso corrette, anche in campo scientifico. Tutto questo, però, con il limite intrinseco della IA, ovvero quello di permetterci una comprensione solo ridotta dell'elaborazione dati che conduce a tali rapide soluzioni. La ricerca scientifica, quindi, potrà sempre trovare stimolo da questo limite della IA per continuare a studiare i principi primi e fondamentali che guidano i complessi fenomeni fisici e chimici che spesso si trovano in natura e tecnologia. Ci sarà dunque modo di insegnare un po' di scienza ai **nostri computer e algoritmi IA**, mentre impareremo da loro nuove possibili soluzioni generate da complesse analisi di grandi quantità di dati. Una sinergia, questa, oltremodo stimolante.

Nuove proteine nel nostro futuro

È a questo punto importante sottolineare il potenziale trasformativo di questi studi scientifici. Le applicazioni vanno dalla medicina personalizzata, dove le nuove proteine possono essere progettate per trattamenti specifici, fino a tecnologie emergenti che potrebbero migliorare sensibilmente il nostro approccio alla salute ed alla sostenibilità, spaziando dalla medicina alle tecnologie green per l'inquinamento, fino alla creazio-

ne di nuovi materiali. Le aziende co-fondate da David Baker, ad esempio, hanno attirato finanziamenti significativi, con investimenti che superano il miliardo di dollari, confermando la fiducia del settore finanziario nella ricerca applicata alla biologia delle proteine. Questi successi non solo pongono le basi per ulteriori scoperte, ma ispirano una nuova generazione di scienziati ad esplorare le infinite possibilità offerte dall'integrazione di biologia e tecnologia. Il Nobel per la Chimica di quest'anno premia, dunque, non soltanto gli straordinari sforzi del passato, ma incoraggia con fiducia un viaggio esplorativo che è solo agli inizi. Il futuro è dunque luminoso, ed il potenziale innovativo è praticamente illimitato.

Ad maiora!

Bibliografia

- [1] J.C. Kendrew, R.E. Dickerson *et al.*, *Nature*, 1958, **181**(4610), 662.
- [2] M.F. Perutz, *Nature*, 1956, **177**, 307.
- [3] C.B. Anfinsen, *Science*, 1973, **181**, 223.
- [4] L. Pauling, H.A. Itano, *Science*, 1949, **110**(2865), 543.
- [5] D. Baker, A. Sali, *Science*, 2001, **294**(5540), 93.
- [6] K.T. Simons C. Kooperberg *et al.*, *Mol. Biol.*, 1997, **268**(1), 209.
- [7] D. Baker, *Science*, 2003, **302**, 1364.
- [8] D. Baker, M.S. Diamond, *Cell Host & Microbe*, 2021, **29**(7), 1151.
- [9] A.W. Senior, R. Evans *et al.*, *Nature*, 2020, **577**, 706.
- [10] J. Jumper, R. Evans *et al.*, *Nature*, 2021, **596**, 583.
- [11] J. Abramson, J. Adler *et al.*, *Nature*, 2024, **630**, 493.

Protein Design: The Computational Breakthrough

The 2024 Nobel Prize in Chemistry was awarded to David Baker, Demis Hassabis, and John Jumper for their transformative work in protein structure prediction and design. Baker's Rosetta software and DeepMind's AlphaFold2 have revolutionized the field, allowing for accurate structural predictions from amino acid sequences. This synergy between AI and computational biology opens new avenues for designing novel proteins with significant implications in medicine and biotechnology.

LA PAROLA “FINE” SULLA PETROLCHIMICA ITALIANA



L'annuncio della decisione di Eni del 24 ottobre scorso, di chiudere alcune attività della chimica, non arriva come un fulmine a ciel sereno. La crisi strutturale di tutta l'industria chimica europea e la debolezza cronica di quello che rimane della petrolchimica italiana, dovevano portare prima o poi ad una decisione radicale. In Italia si chiude definitivamente con la petrolchimica e si investe su un piano ambizioso sulla chimica verde e dei materiali. La società Versalis di Eni chiuderà, infatti, gli ultimi due impianti di steam-cracking di Brindisi e Priolo e quello di reforming di Priolo, uscendo così definitivamente dalla produzione di etilene, propilene, butadiene e aromatici, gli intermedi su cui per oltre settant'anni ha vissuto la petrolchimica italiana.

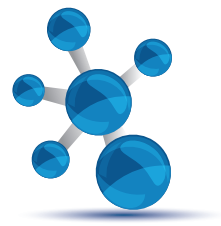
Le conseguenze a cascata sulle produzioni a valle (polietilene, polipropilene, polistirene, elastomeri, fenolo e intermedi per fibre) non sono al momento delineate. Pensare però di mantenere delle produzioni di *commodities*, acquistando sul mercato etilene, propilene, butadiene e benzene, competendo con chi in Europa, America e Asia basa la propria competitività sull'integrazione, è a mio modesto parere illusorio. Per cui nel medio termine, molto probabilmente si chiuderanno anche queste produzioni.

La fine della petrolchimica italiana viene da lontano e non si può certo imputare a chi ha dovuto mantenerla in vita, in uno stato comatoso per decenni. Eni ha fatto quanto di meglio si poteva, perdendoci soldi a palate. Se invece che in Eni queste attività fossero rimaste in mano ai privati, probabilmente avrebbero chiuso i battenti molto prima.

Come vedete ho usato il verbo “dovuto” e non “voluto”, perché Eni è stata obbligata, nel suo ruolo di società in mano allo Stato, ad agire da pronto soccorso sugli errori e sui danni provocati da ben altri capitani d'azienda.

Ovviamente sul fronte della politica tutto tace. Tace il governo, tacciono le parti sociali, tranne il sindacato di settore che ha chiesto un incontro al Governo. La petrolchimica, che per decenni ha dato lavoro a decine e decine di migliaia di dipendenti, ora ne conta poche migliaia. E non interessa più.

Altri sono stati i momenti in cui la chimica industriale e la petrolchimica in particolare, erano vacche grasse da spolpare. Soprattutto durante il boom economico degli anni Sessanta, con l'avvio dei grandi petrolchimici da parte di Montecatini e Edison (poi Montedison), Eni con Anic e più tardi (anni Settanta) Sir e Liquichimica. In quegli anni si avvicendarono sulla scena capitani d'industria dalla gestione “brillante”. Persone come Cefis, Rovelli, Ursini, per citare i più attivi, che diedero vita a quella che venne in seguito chiamata la guerra chimica, con la corsa ad accaparrarsi i finanziamenti pubblici per realizzare vere e proprie cattedrali nel deserto (vedi per esempio Ottana), duplicando impianti inutili o costruendone altri che non furono mai avviati o che vennero chiusi dopo pochi mesi. Quando poi si capì che la pecora era già stata tosata e se si continuava così non c'era più nulla da tosare, cominciò a farsi strada il “refrain”: l'industria chimica italiana è troppo dispersa, troppi siti, piccoli e non integrati. Bisogna fare massa critica, unificare le forze.



Che poi si ridusse ad affibbiare sul gobbo del pubblico (leggi Eni nelle sue diverse articolazioni) quello che per il privato non rendeva più. Negli anni Settanta quando ero studente di Chimica industriale all'Università di Milano, ricordo il prof. Paolo Chini (già collaboratore di Giulio Natta e colui che per primo al mondo sintetizzò in laboratorio, al Politecnico di Milano, il polipropilene isotattico), scagliarsi contro le prime operazioni, nell'ambito del "piano chimico", con cui Montedison passava a Anic alcuni business decotti.

Operazione che fu ripetuta negli anni Ottanta, sotto la sapiente guida di Gianni De Michelis, ministro della partecipazioni statali e professore di Chimica all'Università di Venezia. De Michelis, in una famosa lezione ad Harvard, aveva evidenziato che la petrolchimica italiana era un gigante dai piedi di argilla: troppi siti produttivi, con capacità limitate e non bene integrati. Bisognava razionalizzare, potenziandone alcuni e abbandonandone altri. Ma bisognava soprattutto fare massa critica nei business più importanti. Risultato: a Enichem Anic vennero allocati il polietilene e il PVC, gli acrilici. Mentre Montedison si tenne stretti quelli più allettanti: polipropilene, la chimica del fluoro, la farmaceutica, gli ausiliari per l'industria.

Ma il vero capolavoro fu Enimont.

Qui il regista fu Enrico Cuccia di Mediobanca. E l'attore principale Raul Gardini, manager della Ferruzzi, potenza agroalimentare. Ferruzzi aveva iniziato a comprare azioni della Montedison, retta da Mario Schimberni, già nel 1984, per arrivare a completare la scalata nel 1987. Se non ricordo male, con un esborso complessivo di 600-700 miliardi di lire. Nel 1989 prese vita Enimont, con Enichem e Montedison al 40% ciascuna e il resto flottante. Ma Gardini non conferì in Enimont tutto il business chimico: tenne fuori polipropilene, fluoro, farmaceutica, bioplastiche, catalizzatori e poco altro.

Come finì Enimont è scritto nella storia italiana del 20° secolo: dopo litigi finiti in tribunale, che col senno di poi sembrano montati ad arte, Ferruzzi mollò la sua quota a Eni, per 2805 miliardi di lire. Un vero affare per Gardini e Ferruzzi. Si erano liberati dei business meno profittevoli, avevano conseguito un guadagno secco e avevano in pancia società come Himont, valutata nel 1987 intorno a 5000 miliardi di lire.

Ma per Eni non fu altrettanto.

A fronte di questa operazione furono pagate tangenti a tutta la politica, tanto che quella di Enimont fu chiamata "la madre di tutte le tangenti".

Dal mio punto di vista l'operazione Enimont fu l'inizio della fine. Enichem si trovò a dover gestire gli impianti di steam-cracking di Porto Torres, Brindisi, Priolo, Gela e Porto Marghera. Oltre a quelli di reforming (per la produzione di aromatici) di Priolo, Sarroch, Porto Marghera. Con tanti impianti di polietilene, polimeri e elastomeri, intermedi e fibre, distribuiti sul territorio, prevalentemente nazionale. Le inefficienze già presenti nei due colossi si acuiscono. Navi che andavano su e giù per lo stivale per portare semilavorati da un petrolchimico all'altro, con evidenti costi che gravavano su business già in difficoltà.

Per cui uno alla volta si cominciò a chiudere impianti. Si cominciò con l'impianto di steam-cracking di Porto Torres, poi toccò a quello di Gela e, più di recente, a quello di Porto Marghera. Che, con un effetto domino, portarono alla chiusura di impianti di polietilene, di aromatici, di intermedi. E ora siamo alle battute finali.

In ogni caso in pochi piangeranno a questo funerale. Forse io e pochi nostalgici come me che nella petrolchimica sono cresciuti e ci hanno bazzicato per oltre mezzo secolo. E sicuramente molti giovani ci guarderanno come dei poveri *boomer*, che non sanno cogliere i segni dei tempi e la forte spinta all'innovazione.

Resta il fatto che la nostra società continuerà per qualche decennio a usare i polimeri e le fibre di cui sopra, per costruire auto, treni, aerei, navi, frigoriferi, cucine, stoffe, materiali speciali, lubrificanti, cosmetici, imballaggi, bottiglie. Solo che questi materiali, che fanno torcere il naso a tanti ambientalisti, non li faremo più in Italia e forse neanche in Europa. Ci arriveranno dalla Cina, dall'India, dal Golfo Persico, insomma dai *brics*. E noi ci limiteremo a trasformarli in prodotti finiti. Almeno fintanto che, non avendo più il controllo sulle materie prime, non saremo più competitivi nel manifatturiero e dagli stessi Paesi ci arriveranno i prodotti finiti. Se avremo le risorse per comprarli. Ma questa è un'altra storia, che in parte stiamo già vivendo in altri settori industriali, come l'industria automobilistica.



Andrew Smith^a, Dario Compagnone^b

^aDipartimento di Medicina e Chirurgia
Università di Milano-Bicocca

^bDipartimento di Bioscienze e Tecnologie Agro-Alimentari e Ambientali
Università di Teramo

ADVANCED MONITORING, SENSING AND IMAGING

La sessione tematica “Advanced monitoring, sensing and imaging” ha coinvolto ricercatori in ambito nazionale ed internazionale nella discussione riguardo lo stato dell’arte nelle tecnologie di monitoraggio, sensing e imaging, indirizzate ad applicazioni nelle aree della salute, del monitoraggio ambientale e del food-omics. In particolare, in questa sessione i recenti approcci strumentali e metodologici hanno ben messo in evidenza le potenzialità di diversi metodi, da quelli di spettrometria di massa, alla risonanza magnetica nucleare, ai biosensori.



Fig. 1 - Zoltan Takats

La sessione si è aperta con la presentazione di Zoltan Takats dell’Università di Ratisbona (Fig. 1) che ha illustrato le potenzialità della “Rapid Evaporative Ionisation Mass Spectrometry” combinata con sorgenti di ablazione laser infrarosso (risonante in picosecondi) per la mappatura del metabolismo cellulare. La metodologia consente di generare dati utilizzabili in ambito biomedico, in microbiologia clinica, istopatologia, chimica clinica e, carattere più innovativo, per interventi medici invasivi/diagnostici. La tecnologia sarà certamente integrabile nei sistemi sanitari a breve termine. Sono seguiti interventi sull’uso della spettrometria di massa (MS) nella “spatial biology”, tenuti da Vincenzo L’Imperio dell’Università di Milano Bicocca e da Lucy Flint di Astrazeneca; il primo interven-

to ha presentato applicazioni recenti di “imaging” mediante spettrometria di massa in nefropatologia, mentre il secondo intervento ha introdotto le possibilità di applicazione della “spatial biology” dallo sviluppo rapido di farmaci a contesti clinici di routine con una visione legata al mondo produttivo.

Particolare attenzione è stata dedicata ad applicazioni di biosensori per la loro versatilità e possibilità di miniaturizzazione. Per quanto riguarda applicazioni riguardanti l’ambito clinico, Giuseppe Spoto dell’Università di Catania (Fig. 2) ha riportato un approccio molto interessante di biosensori a risonanza plasmonica superficiale (SPR) basato su tecniche di imaging. La determinazione di DNA



Fig. 2 - Giuseppe Spoto



circolante come marcatore tumorale, amplificata mediante l'uso di nanoparticelle d'oro, consente la rilevazione in pazienti oncologici. Questa tecnica, combinata con design innovativo di superfici dei sensori plasmonici, (per esempio l'uso di un nuovo strato superficiale in poli-L-lisina), offre prospettive entusiasmanti per la diagnosi dei tumori mediante biopsia liquida. Luisa Torsi dell'Università Aldo Moro di Bari ha presentato test a flusso laterale e dispositivi bioelettronici palmari basati sulla tecnologia SiMoT (Single-Molecule with a large Transistor) come strumenti diagnostici ultrasensibili e robusti per la diagnostica *in vitro*. Di particolare rilevanza la previsione di avanzamento della tecnologia da TRL5 a TRL7 e l'inizio di sperimentazioni cliniche per l'analisi decentralizzata di campioni biologici.

Infine, sempre nell'area biosensori Giovanna Marrazza dell'Università di Firenze, ha focalizzato l'attenzione sull'integrazione di (bio)sensori con dispositivi portatili per una rilevazione rapida e sostenibile nel settore delle analisi degli alimenti. Sono state esplorate le principali innovazioni riguardanti l'uso di nanomateriali e nuovi recettori sintetici in grado di migliorare sensibilità, selettività e velocità rendendo i biosensori ideali per l'uso in varie applicazioni di sicurezza alimentare.

Nell'ambito di strumentazione portatile, Noemi Proietti dell'Istituto di Scienze del Patrimonio Culturale (CNR) ha presentato una serie di applicazioni utilizzando Risonanza Magnetica Nucleare (NMR) con strumentazione portatile evidenziando come la riduzione delle dimensioni abbia reso possibile l'utilizzo dell'NMR, pur con prestazioni ridotte, a tutti i laboratori. Le applicazioni riportate hanno riguardato prodotti polimerici, alimenti, tessuti biologici e patrimonio culturale. L'uso dell'NMR come strumento, invece, per ottenere informazioni approfondite riguardo la dinamica di diffusione di piccole molecole all'interno di ambienti limitati nelle dimensioni, è stata trattata nel pomeriggio da Andrea Mele del Politecnico di Milano. In particolare, un NMR "magic angle" (NMR-MAS) ad alta risoluzione può essere utilizzato, in combinazione con un segnale spin-echo con gradiente ad impulsi (PGSE) per valutare le caratteristiche di diffusione di soluti in pori di idrogeli ed eutettogeli.

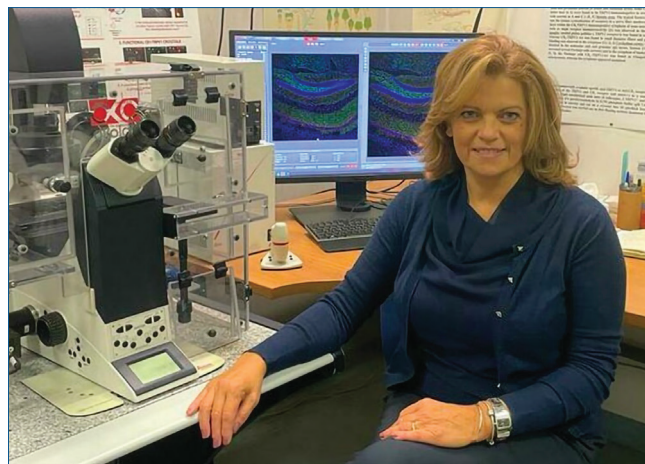


Fig. 3 - Luigia Cristino

I risultati sperimentali, trattati attraverso modelli matematici adeguati, possono interpretare modelli di diffusione non Fickiani.

In riferimento alla potenzialità di NMR ma per applicazioni di imaging in ambito clinico, ci sono stati diversi contributi molto interessanti che hanno mostrato progressi recenti. Daniela Delli Castelli dell'Università di Torino ha fornito la sua visione del panorama attuale dei mezzi di contrasto in riferimento alle potenzialità della MRI-CEST (Magnetic Resonance Imaging-Chemical Exchange Saturation Transfer) per misure *in vivo* di 'imaging metabolico', con enfasi sulle potenzialità e sulle sfide da affrontare. Luigia Cristino dell'Istituto di Chimica Biomolecolare (CNR) (Fig. 3) ha presentato un approccio integrato di imaging per il monitoraggio della comunicazione neurochimica neurone/glia in reti cerebrali sane e malate, relativamente alla caratterizzazione delle risposte neuronali a molecole organiche bioattive, quali (endo)cannabinoidi e metaboliti derivati dal microbiota intestinale. Infine, Mariosimone Zoccali dell'Università di Messina (Fig. 4) ha analizzato in dettaglio le capacità di imaging virtuale come strumento per l'identificazione di molecole sconosciute attraverso tecniche di cromatografia bidimensionale, mediante ricostruzione e analisi bidimensionale di cromatogrammi, in cui i composti vengono separati sistematicamente in base alle loro proprietà e ai diversi meccanismi di ritenzione.

A conferma delle potenzialità della cromatografia bidimensionale il contributo di Chiara Cordero



Fig. 4 - Mariosimone Zoccali

dell'Università di Torino ha illustrato come gruppi complessi di dati derivati dalla cromatografia a gas bidimensionale (GC×GC) possano essere utilizzati nell'area di applicazione del "food-omic" utilizzando strumenti di intelligenza artificiale "vediamo ciò che annusiamo".

La sessione è stata inoltre oggetto di approfondimenti riguardo tecnologie all'avanguardia per lo sviluppo di dispositivi e per la produzione di nanomateriali. Pietro Gucciardi dell'IPCN-CNR (Fig. 5) ha fornito una panoramica dei più recenti progressi e delle sfide future riguardo lo sviluppo di setup portatili di Raman Tweezer (RT) interfacciati con microfluidica per l'analisi di frammenti di microplastiche (MP) e nanoplastiche (NP). Infine, ha anche discusso un nuovo metodo per sospendere, e analizzare, particelle sospese in aria in modalità "no-touch" attraverso delle Raman Acoustic Tweezers (Raman-AT). Giuseppe Compagnini ha invece discusso strategie recenti per la deposizione di strati plasmonici di nanoparticelle su sub-

strati solidi al fine di ottenere nanomateriali "puliti" con caratteristiche plasmoniche adatte a scopi sia di diagnostica che di produzione di materiali nel campo della produzione di energia.

La sessione nella sua interezza è risultata molto interessante in considerazione del numero di persone presenti in media e delle numerose domande rivolte ai presentatori. Certamente gli approcci innovativi riportati e le diverse metodologie applicate da gruppi di ricerca operanti in un contesto multidisciplinare quale quello del "monitoring sensing e imaging" saranno di ispirazione per implementare applicazioni nell'area biomedica, alimentare e ambientale.



Fig. 5 - Pietro Gucciardi

Advanced Monitoring, Sensing and Imaging

The session "Advanced Monitoring, Sensing and Imaging" gathered an international field of academics to discuss the current state-of-art in monitoring, sensing, and imaging technologies, with a strong focus on their application in the areas of human health, environmental monitoring, and food-omics. In particular, this session highlighted the power of several technologies, ranging from mass spectrometry to biosensors.



**KAHLBERG
CONSULTING**

UNA VISIONE STRATEGICA, OLTRE LA NORMATIVA

**REACH
POLIMERI**

Consorzi, Grouping, RegISTRAZIONI

PRODUCT SAFETY

(GHS; Regolamento CLP; MSDS Notifiche PCN e SCIP, SVHC)

KKDIK - REACH Turco

UK REACH

K-REACH - Corea

DB REACH Polymers

IL MIGLIOR SOFTWARE per la gestione
del vostro **PORTFOLIO POLIMERI**, per essere
pronti al Nuovo Regolamento **REACH**:

- FORMULAZIONE**
- GRUPPI FUNZIONALI**
- PROPRIETÀ CHIMICO-FISICHE**
- NOTIFICA**
- ALTRE IMPORTANTI FUNZIONI**

in collaborazione con



Know the rules, play your market.



EUROPA - TURCHIA - UK - COREA - RESTO DEL MONDO
www.kahlbergconsulting.com



Antonio Marcomini^a, Concetta De Stefano^b

^aDipartimento di Scienze Ambientali, Informatica e Statistica, Università Ca' Foscari di Venezia e Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali

^bDipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche e Ambientali, Università di Messina e Divisione di Chimica Analitica

marcomini@unive.it; concetta.destefano@unime.it

ENVIRONMENTAL PROTECTION

La sessione Environmental Protection si è focalizzata su tre problematiche ambientali di grande attualità che connotano la protezione dell'ambiente in Italia e altrove. Ciascuna problematica è stata aperta da due key lectures seguite da una tavola rotonda. La sessione si è chiusa con tre presentazioni associate al conferimento delle medaglie "Meadows & Feller", "Mario Molina" e "Arnaldo Liberti".

Premessa

L'istituzione del Ministero dell'Ambiente (1985) e delle Agenzie regionali di protezione ambientale coordinate dalla Agenzia nazionale (ANPA) (anni Novanta), nonché la normativa ambientale, a partire da quella europea, hanno dato un impulso fondamentale a ricerca e formazione finalizzate allo sviluppo di tecniche e tecnologie per il trattamento di acque di scarico e rifiuti, e per il risanamento di acque, aria e suoli, in modo da rispondere alle richieste di standard di qualità ambientale e obiettivi di risanamento via via più stringenti. La comunità scientifica internazionale e nazionale impegnata nella ricerca ambientale è fortemente cresciuta, sia quantitativamente che qualitativamente. Basti pensare alle numerose riviste scientifiche riguardanti l'ambiente con fattori di impatto elevati (i.e. IF>5.0). In considerazione di questo quadro complessivo di riferimento, i coordinatori e i membri del Tavolo di coordinamento (Prof. Maurizio Ferretti, Divisione di Chimica Fisica; Prof.ssa Margherita Venturi, Divisione Didattica Chimica; Prof.ssa Chiara Zanardi, Divisione di Chimica Analitica; Prof. Carmelo Sgarlata, Gruppo Interdivisionale di Calorimetria e Analisi Termica; Dr.ssa Alessandra Criscuoli e Prof. Cristian Durante, Divisione di Elettrochimica) hanno organizzato tre sessioni: la prima dal titolo "PFAS: Advances in quantification, remediation and elimination", la seconda "Environmental remediation of contaminated sites" e la terza "Circular economy: critical raw materials and their recycling". Ogni sessione ha previsto due keynote e una tavola rotonda. A queste tre sessioni, sono seguite, nell'ultima sessione, le tre presentazioni associate al conferimento delle seguenti medaglie:

"Meadows & Feller" e "Mario Molina" assegnate dalla Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, e "Arnaldo Liberti" assegnata, congiuntamente, dalle Divisioni di Chimica Analitica e di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali e dal Gruppo Interdivisionale di Scienze della Separazione.

I sessione

PFAS: Advances in Quantification, Remediation and Elimination

Chair di sessione: Antonio Marcomini e Chiara Zanardi, Università Ca' Foscari Venezia

Rilevanza della contaminazione da sostanze per- and polifluoroalchiliche (PFAS) in Italia

Sara Valsecchi, Istituto di Ricerca sulle Acque, Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR-IRSA)

La presentazione ha fornito il quadro complessivo dell'inquinamento da PFAS in Italia. Gli effluenti finali e i fanghi di impianti di depurazione civili e industriali, soprattutto quelli degli impianti fluorochimici e fluoropolimerici, sono le principali sorgenti primarie di PFAS per l'ambiente acquatico. Non meno importante come fonte di contaminazione ambientale in Italia è il ciclo dei rifiuti proprio a causa dell'estrema stabilità chimica e della mobilità ambientale dei PFAS.

PFAS pollution in the aquifers of central Veneto Region: hydrogeological features and environmental implications

Andrea Sottani, Sinergeo, Vicenza

È stato spiegato come l'inquinamento delle falde acquifere del Veneto centrale da PFAS rappresenta un'emergenza ambientale nazionale ed è diven-



tato un problema di salute pubblica a causa dell'esposizione di almeno 300 mila persone che hanno ingerito acqua potabile contaminata. La presentazione ha permesso di esaminare il caso di studio anche dal punto di vista delle implicazioni sociali ed economiche che ha comportato.

La tavola rotonda che ne è seguita ha coinvolto Giuseppina Amato (ATS-Milano), Andrea Sottani e Sara Valsecchi. La dott.ssa Amato ha presentato brevemente le attività che ATS-Milano svolge nel campo del controllo analitico dei PFAS nelle acque e ha focalizzato il suo intervento sulla normativa e su alcune delle problematiche legate alla loro determinazione quali-quantitativa. I temi che sono stati affrontati durante la tavola rotonda, che hanno coinvolto anche il pubblico presente in sala, hanno riguardato il recepimento della normativa europea e nazionale sui PFAS e la sua implementazione, la prevenzione dell'inquinamento da PFAS, le tecniche analitiche avanzate per la loro determinazione e le strategie di bonifica delle acque contaminate da PFAS.

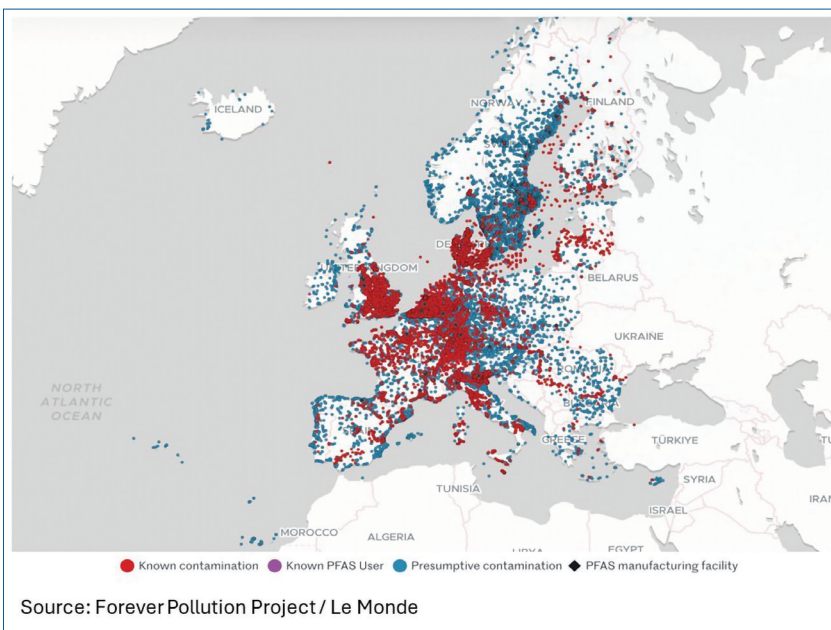
Il sessione Environmental Remediation of Contaminated Sites

Chair di sessione: Concetta De Stefano,
Università di Messina

*The Remediation in the National System
of Environmental Protection: state-of-the-art
and perspectives*

Michele Fratini, Federico Araneo, Eugenia Bartolucci, Istituto Superiore per la Protezione e Ricerca Ambientale (ISPRA), Roma

Il Sistema Nazionale per la Protezione Ambientale (SNPA) è una rete composta da ISPRA e dalle 21 Agenzie Territoriali per la Protezione Ambientale (ARPA/APPA) istituite con leggi regionali. Fra gli altri suoi compiti, SNPA assicura il proprio supporto tecnico al Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica (MASE) sulle attività dei siti



Contaminazione da PFAS in Europa

contaminati di interesse nazionale ed elabora linee guida e documenti tecnici per la caratterizzazione e la bonifica dei siti contaminati. È stato presentato MOSAICO, il catasto nazionale dei siti contaminati in Italia. MOSAICO contiene dati relativi a siti interessati da oltre 33 mila procedure di gestione, in corso o concluse, e consente di analizzare l'avanzamento della gestione e lo stato di contaminazione delle procedure in corso, le modalità di chiusura di quelle concluse e la loro durata temporale.

*Emerging technologies
for environmental remediation*

Michele Mascia, Laura Mais, Annalisa Vacca,
Nicola Melis, Università di Cagliari

La bonifica di siti contaminati da inquinanti organici e inorganici può portare a prodotti finali utili, tra cui idrogeno ed elettricità. Sono state presentate le principali tecnologie esistenti, in particolare quelle elettrochimiche, e sono stati discussi alcuni casi di studio in cui tecnologie biologiche, chimiche ed elettrochimiche vengono congiuntamente applicate alla bonifica di suoli e acque su scala pilota. I risultati sperimentali sono stati quindi utilizzati in una simulazione del sistema integrato di scrubbing ed elettrolisi.

La tavola rotonda che ne è seguita ha coinvolto Marco Tagliabue (ENI, Roma) e Andrea Sottani (Si-



Sito di Interesse Nazionale di Pioltello-Rodano (siti contaminati)
<https://www.isprambiente.gov.it/it/attivita/suolo-e-territorio/siti-contaminati>

nergeo, Vicenza). Ognuno degli invitati ha presentato brevemente la sua attività in azienda e successivamente sono stati affrontati i problemi legati alla caratterizzazione e all'impiego delle tecnologie emergenti per la bonifica di suoli e acque sotterranee nei siti contaminati. È stata discussa l'importanza dell'utilizzo di modelli idrogeologici di inquinanti organici e inorganici per la caratterizzazione finalizzata alla bonifica e l'utilizzo di strategie di bonifica ecosostenibili, efficienti e a basso costo.

III sessione

Circular Economy:

Critical Raw Materials and their Recycling

Chair di sessione: Alessandra Criscuoli, Istituto per la Tecnologia delle Membrane (CNR-ITM)

Critical chemical elements for the energy transition
Nicola Armaroli, Istituto per la Sintesi Organica e la Fotoreattività, CNR, Bologna

Nel 1990 un'intera casa conteneva in genere circa 20 elementi chimici. Oggi ci sono più di 40 elementi solo in uno smartphone. L'uso di alcuni elementi definiti "critici" è particolarmente rilevante per le tecnologie di conversione e stoccaggio di energia rinnovabile che sono fondamentali per la decarbonizzazione della civiltà moderna: pannelli fotovoltaici, turbine eoliche, batterie, celle a combustibile, infrastrutture di rete ecc. Sono stati discussi i principali colli di bottiglia associati ai materiali per la transizione energetica, rivolgendo l'attenzione principalmente alla mobilità sostenibile e alla ge-

nerazione e allo stoccaggio di energia rinnovabile (per un approfondimento si veda: N. Armaroli, *Fossil fuels exit: challenges, perspectives, bottlenecks*, The Oxford Handbook on the Greening of Economic Development, Oxford University Press, 2024).

The arrow of time in recycling materials from energy storage devices
Luca Magagnin, Politecnico di Milano

La crescente domanda di energia verde e rinnovabile nell'UE, unita alla vulnerabilità delle catene di fornitura per le materie prime chiave, sta determinando la necessità di recuperare i materiali utilizzati nelle applicazioni di transizione verde (ad esempio batterie e pannelli fotovoltaici, ecc.). Ciò rappresenta un'opportunità per ridurre il rischio di inquinamento a valle derivante dallo smaltimento o dal riciclaggio di questi articoli (v. www.eea.europa.eu/en/european-zero-pollution-dashboards/indicators/recycling-from-green-technology). Gli sviluppi nella tecnologia del riciclaggio si sono concentrati in gran parte su prodotti a breve ciclo di vita (e.g. rifiuti di plastica da imballaggi, elettronica di consumo e detriti edili), mentre prodotti elettronici complessi, ricchi di risorse e a lungo ciclo di vita, componenti di accumulo di energia e fotovoltaici sono stati trascurati a causa della loro proprietà intrinseca di contenere più materiali in modo complesso. I prodotti di alto valore contengono elementi preziosi, che sono incorporati in modo intricato e spesso persi a fine vita (v. V. Sahajwalla, R. Hossain, *MRS Bulletin*, 2023, **48**, 375). Sono state presentate le tecnologie e i processi disponibili per trasformare i rifiuti dei dispositivi di accumulo di energia in materie prime secondarie e illustrati i nuovi paradigmi necessari per le tecniche di riciclaggio.

La successiva tavola rotonda su "*Critical raw materials, recycling and substitution*" ha coinvolto Daniele Modesto (ZERO, Pordenone) e Luca Campadello (Erion Compliance Organization, Milano). I temi che sono stati affrontati e che hanno suscitato un animato e proficuo dibattito, con numerosi interventi da parte del pubblico, hanno riguardato le tecnologie disponibili per il recupero dei *critical raw materials* e lo smaltimento dei componenti chimici indesiderati, l'efficienza di queste tecnologie e



la loro convenienza dal punto di vista economico. Sono state, inoltre, discusse le nuove prospettive per la sostituzione delle materie prime critiche e il loro impatto in termini di sostenibilità.

Environmental Protection: medaglie

Chair di sessione: Carmelo Sgarlata, Università di Catania; Luigi Mondello, Università di Messina; Antonio Proto, Università di Salerno; Tommaso Cataldi, Università di Bari Aldo Moro

Medaglia 'Mario Molina':

Assessing the environmental impact in anthropogenic elemental cycles

Luca Ciacci, Università di Bologna

La caratterizzazione dei cicli elementari ha una lunga tradizione nella chimica ambientale ed è stata guidata da due obiettivi principali: fornire una solida comprensione scientifica e farlo con una certa affidabilità per supportare azioni volte a mitigare l'impatto dell'attività umana sull'ecosistema. Le nuove sfide della sostenibilità hanno motivato l'estensione dell'analisi al ciclo antropico delle risorse, caratterizzando i) i modi in cui i sistemi umani utilizzano i materiali e ii) l'entità della loro interazione con l'ambiente. Il lavoro condotto ha affrontato la prima esigenza seguendo tecniche di analisi del flusso di materiali e la seconda applicando la valutazione del ciclo di vita (LCA) con l'obiettivo di supportare una migliore gestione delle risorse naturali e la protezione ambientale.

Medaglia Meadows & Feller: Sustainability, circular economy and chemistry

Fabrizio Passarini, Università di Bologna

Il paradigma dell'economia circolare è diventato un modo vitale per sviluppare il futuro sistema sociale e produttivo (v. **Ellen Macarthur Foundation**). Come economia circolare e sostenibilità potrebbero progredire insieme? La sostenibilità è l'obiettivo finale delle attività umane, può essere misurata attraverso diversi approcci tra cui il Life Cycle Assessment che è il più comune e ampiamente utilizzato, con un'importante applicazione anche nell'industria chimica (v. D. Cespi *et al.*, Life Cycle Assessment in the Chemical Product Chain: Challenges, Methodological Approaches and Applications, Springer Nature Switzerland AG, 2020,

53-73). Al contrario, la circolarità è uno strumento, che è solitamente il modo migliore per raggiungere tale obiettivo, anche se non può essere definita sostenibile "di default". La chimica ha svolto e potrà continuare a svolgere un ruolo cruciale nella comprensione e nello sviluppo di questi concetti (D. Meadows, The limits to growth, Club di Roma, 1972, un documento fondamentale sui confini fisici del nostro pianeta; M. Braungart, uno dei principali ispiratori del principio "dalla culla alla culla", concetto strettamente correlato all'economia circolare, W. McDonough, M. Braungart, Cradle to Cradle: Remaking the Way We Make Things, North Point Press, New York, 2002).

Medaglia Liberti: The challenging role of chromatography in environmental analysis: unveiling the polyhedrality of separation sciences

Maria Concetta Bruzzoniti, Università di Torino

Si è evidenziato come la scienza della separazione, e principalmente la cromatografia liquida, sia un approccio strategico per affrontare le sfide dell'analisi ambientale in tutte le sue fasi chiave. Identificazione e quantificazione accurate in varie matrici ambientali sono la base per una corretta interpretazione dei dati ottenuti, per una valutazione affidabile del rischio [1, 2] e per l'emissione di raccomandazioni per azioni politiche [3]. L'analisi ambientale affronta sfide analitiche dovute al raggiungimento di bassi limiti di rilevamento e di elevata selettività e specificità in accordo con richieste normative e di standardizzazione.

[1] M.C. Bruzzoniti *et al.*, *Environmental Research*, 2024, 242.

[2] M.C. Bruzzoniti *et al.*, *Water*, 2024, **16**(6), 830.

[3] M.C. Bruzzoniti *et al.*, *J. Chromatography A*, 2019, 1605.

Environmental Protection

The Environmental Protection session focused on three highly topical environmental issues that characterize environmental protection in Italy and elsewhere. Each issue was opened by two key lectures followed by a round table. The session closed with three presentations associated with the awarding of the "Meadows & Feller", "Mario Molina" and "Arnaldo Liberti" medals.

Maria Laura Bolognesi^a, Paolo Caliceti^b^aDipartimento di Farmacia e Biotecnologie, Università di Bologna Alma Mater^bDipartimento di Scienze del Farmaco, Università di Padova

marialaura.bolognesi@unibo.it, paolo.caliceti@unipd.it

CHIMICA E MEDICINA DI PRECISIONE IN ITALIA

La medicina di precisione rappresenta un nuovo entusiasmante approccio alla ricerca in ambito salute, con il potenziale di trasformare il modo in cui diagnosticiamo e curiamo le malattie. Questo approccio presenta numerose opportunità per l'avanzamento della chimica, che, a propria volta, può contribuire in modo significativo al raggiungimento dei suoi obiettivi attraverso l'integrazione di competenze e prospettive diverse.

Introduzione

Con il termine “medicina di precisione” si intende quell’insieme di strategie di diagnosi, prevenzione e trattamento terapeutico progettato sulla base della variabilità genetica e metabolica di ogni individuo. La medicina di precisione rappresenta quindi un nuovo paradigma terapeutico rispetto al più generico “one-size-fits-all”, fino ad oggi maggiormente applicato [F.S. Collins, H. Varmus, *N. Engl. J. Med.*, 2015, **372**(9), 793]. La medicina di precisione è il risultato di una complessa combinazione di ricerche e conoscenze interdisciplinari che ha coinvolto, in particolare, le scienze biomediche, chimiche e tecnologiche. I progressi delle discipline omiche hanno portato negli ultimi 25 anni alla possibilità di definire i fattori genetici individuali di predisposizione o di sviluppo di patologie. Su questa base, le discipline chimiche e tecnologiche hanno sviluppato innovativi sistemi terapeutici costituiti da farmaci squisitamente “mirati” e selettivi e sistemi di veicolazione (*drug delivery systems*) in grado di rilasciare il farmaco in modo spazialmente e temporalmente controllato.

Il cancro, la malattia che più di tutte scaturlisce in seguito a precise mutazioni genetiche, è la patologia che oggi meglio epitoma le potenzialità della medicina di precisione [G.M. Church, *ACS Cent. Sci.*, 2015, **1**, 11]. Tuttavia, stanno emergendo opportunità di terapie personalizzate per molte altre aree terapeutiche con lo sviluppo di farmaci allele-specifici (ad esempio, Ivacaftor rivolto al 5% dei pazienti con fibrosi cistica con la specifica mutazione G551D) combinati a sistemi di *controlled drug delivery*.

In un contesto di costante sviluppo, anche a livello italiano, si delineano sempre più chiaramente nuove aree di interesse per i chimici e la chimica. La medicina di precisione offre molte opportunità per il progresso della chimica, e la chimica, a propria volta, può fare molto per contribuire ai suoi obiettivi. Per questo motivo, durante il congresso SCI 2024 della Società Chimica Italiana, fortemente caratterizzato da una *mission* interdisciplinare ispirata e sostenuta dal Presidente Gianluca Farinola e da tutto il Consiglio Centrale, si è ritenuto di mettere a sistema in una visione olistica le ultime linee di ricerca chimica sulla medicina di precisione, dedicando la Sessione Parallela Health al tema “Chemistry for Precision Medicine”.

Ad aprire la sessione, una storia di successo “made in Italy” condivisa dalla dottoressa Elena Ardini di Nerviano Medical Sciences (NMS), industria nata dalle vestigia della storica azienda farmaceutica Carlo Erba, che da anni adotta approcci innovativi alla ricerca di nuovi meccanismi d’azione e bersagli molecolari per lo sviluppo di farmaci personalizzati per la cura del cancro. In particolare, l’identificazione di riarrangiamenti cromosomici ricorrenti dei geni ROS1 (ROS proto-oncogene 1) e ALK (Anaplastic Lymphoma Kinase) in sottogruppi di pazienti con cancro del polmone, ha portato il team della Ardini allo sviluppo di entrectinib (Fig. 1), un inibitore altamente potente e selettivo di entrambe le chinasi ROS1 e ALK, registrato per il trattamento di pazienti che presentano tali alterazioni genetiche. La dott.ssa Ardini ha ripercorso con i numerosi presenti in aula lo sviluppo

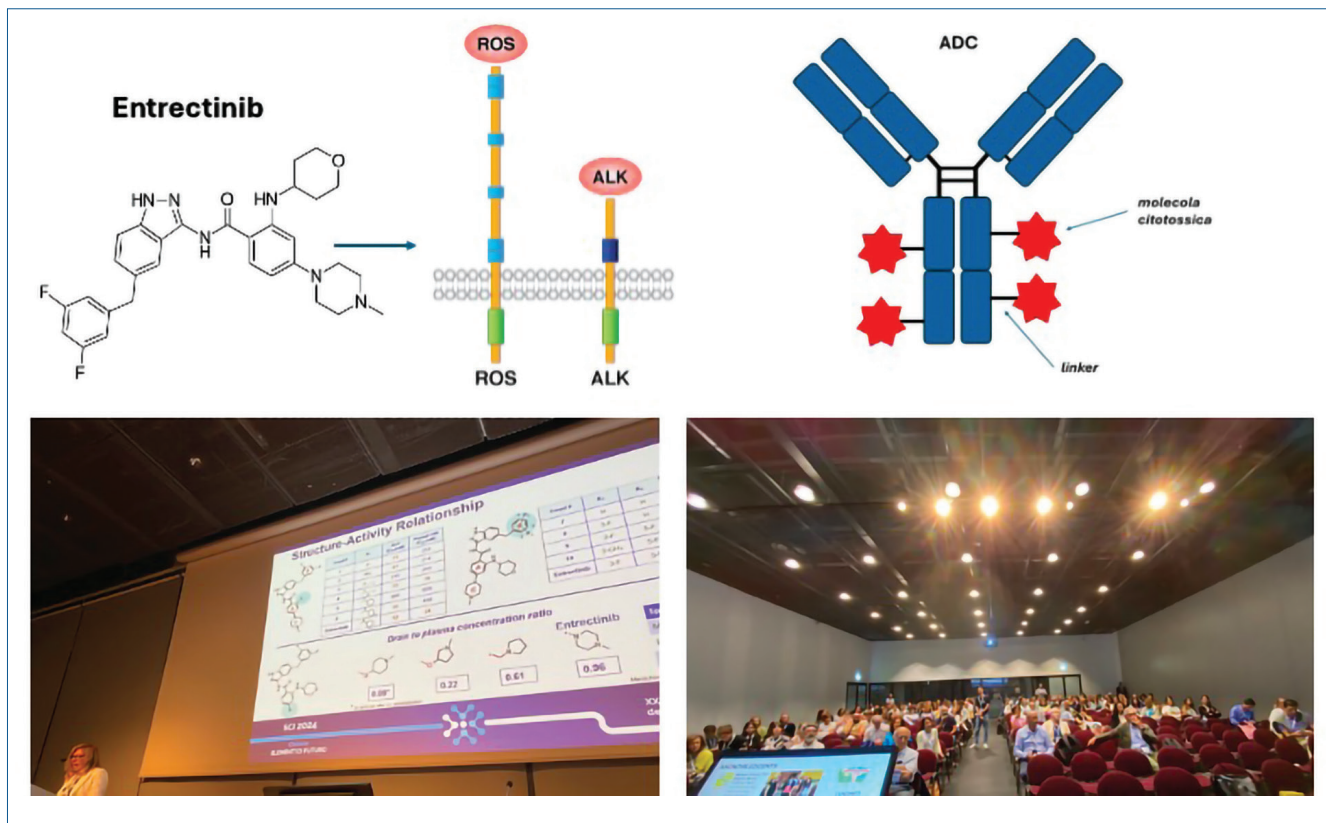


Fig. 1 - Esempi di successo clinico di farmaci per la medicina di precisione (l'inibitore delle chinasi ROS e ALK encrentinib e i coniugati farmaco-anticorpo, ADC) discussi durante la sessione Parallel Topic: Health del congresso SCI2024. La dottoressa Ardini presenta lo sviluppo di encrentinib alla platea dei numerosi chimici presenti in aula

chimico della molecola, compendiato dalla storia del successo clinico, portando un'esperienza concreta di come la chimica possa salvare la vita di molti pazienti affetti da patologie ritenute incurabili.

La sessione è poi continuata con il premio alla ricerca "Chimica organica per le scienze della vita" della Divisione di Chimica Organica, rappresentata in aula dalla professoressa Maria Valeria D'Auria, conferito alla professoressa Giorgia Oliviero dell'Università degli Studi di Napoli Federico II. Con la sua relazione, la professoressa Oliviero ha dimostrato come, oltre a essere gli elementi costitutivi della vita, gli acidi nucleici negli ultimi anni abbiano pienamente rivelato il loro potenziale in campo diagnostico e terapeutico, rappresentando non solo il bersaglio per interventi di medicina personalizzata, ma costituendo veri e propri farmaci "mirati". I chimici sono stati fondamentali nell'aprire queste nuove possibilità, attraverso la scoperta di nuove metodologie di sintesi e di caratterizzazione di brevi frammenti di acido nucleico, gli oligonucleotidi. L'incorporazione

di modifiche strutturali sullo zucchero, sulla base azotata o su entrambi ha conferito loro proprietà essenziali per applicazioni mirate in medicina e diagnostica. Rimanendo nel campo degli acidi nucleici, la professoressa Claudia Sissi dell'Università di Padova ha dimostrato come la comprensione dettagliata di una struttura secondaria non canonica del DNA o dell'RNA e dei meccanismi biologici in cui essa è coinvolta, oltre a portare ad un avanzamento delle conoscenze di base, può anche aprire nuove frontiere nella progettazione di nuovi farmaci antitumorali innovativi e di precisione. A supporto di ciò, la professoressa Sissi ha riportato le sue ultime ricerche su motivi strutturali denominati i-Motifs (iMs) che possono verificarsi nelle sequenze ricche di citosine (Fig. 2), discutendo su come queste strutture si comportano in diverse condizioni sperimentali e come cambiamenti minimi nella chimica o nella loro sequenza possano determinare proprietà diverse. Sulla stessa scia, la relazione della professoressa Jussara Amato dell'Università degli Studi di Napoli

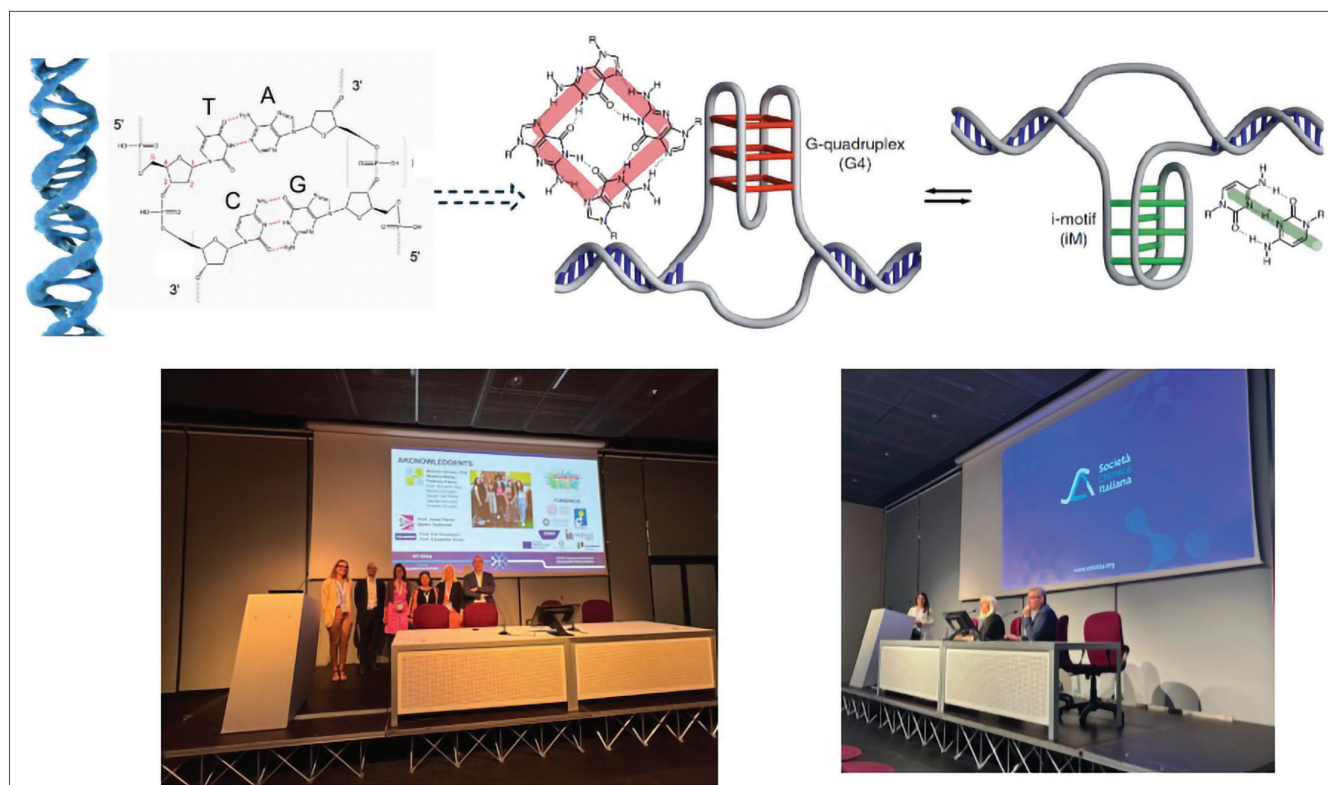


Fig. 2 - DNA e motivi strutturali non canonici (*G-quadruplex* e gli *i-motif*) come bersaglio di farmaci per la medicina di precisione e come farmaci "mirati" sono stati oggetto delle relazioni delle professoresse Oliviero, Sissi e Amato immortalate nelle foto insieme ai Chair della Sessione Maria Laura Bolognesi e Paolo Caliceti

Federico II si è incentrata su particolari strutture non canoniche di DNA o RNA, i G-quadruplex (G4) (Fig. 2), anch'essi affascinanti bersagli terapeutici per la medicina di precisione. La relazione ha affrontato il tema dello sviluppo di ligandi dotati di maggiore affinità e specificità, requisiti essenziali per realizzare a pieno il potenziale terapeutico delle piccole molecole dirette a G4.

Un'altra classe di molecole che ha contribuito al successo della medicina di precisione è stata discussa da due diverse prospettive dalla dottoressa Barbara Valsasina di NMS e Gianfranco Pasut dell'Università di Padova, in un *joint talk* dal titolo "Innovation in Precision Medicine: Antibody-Drug Conjugates". Grazie alla sinergia che si riesce ad ottenere nell'andare a legare covalentemente un farmaco citotossico con un anticorpo monoclonale tumore-specifico, i coniugati farmaco-anticorpo (ADC) (Fig. 1) hanno già dimostrato efficacia clinica contro vari tumori, con 13 ADC sul mercato e più di 100 in sperimentazione. Un ADC, mirato a uno specifico antigene tumorale, una volta legato all'antigene, forma un complesso ADC-antigene che viene internalizzato nella cellula tumorale e indirizzato ai lisosomi, dove il farmaco viene rilasciato attraverso una fase enzimatica, idrolitica o riducen-

te. Quindi, uno dei fattori che influenza la loro attività riguarda il tipo di *linker*, che va a determinare in maniera critica il meccanismo e la velocità di rilascio del farmaco o il carico dello stesso. I due relatori hanno presentato due diverse strategie chimiche per ottimizzare questa caratteristica.

Un momento toccante è stato quello della relazione del dottor Alessandro Gori dell'Istituto di Scienze e Tecnologie chimiche 'Giulio Natta' (Scitec) del CNR, che ha sostituito la dott.ssa Marina Cretich, scomparsa prematuramente nel luglio 2024, ricordata dalla platea con un minuto di silenzio. Il gruppo della dottoressa Cretich ha contribuito alla medicina di precisione interessandosi allo studio di vescicole extracellulari (VE); per primo ha sviluppato una tecnologia che ha rappresentato un cambio di paradigma nello sviluppo di sonde di affinità per queste vescicole, basata sull'utilizzo di peptidi sensibili alla curvatura delle membrane (*membrane sensing peptides* - MSP) per la cattura specifica e allo stesso tempo generale in quanto non dipendente da marcatori superficiali. Le applicazioni di questa classe di peptidi in campo diagnostico e nella produzione di VE sono state l'argomento di questa relazione. Un interessante esempio della necessità della ricerca

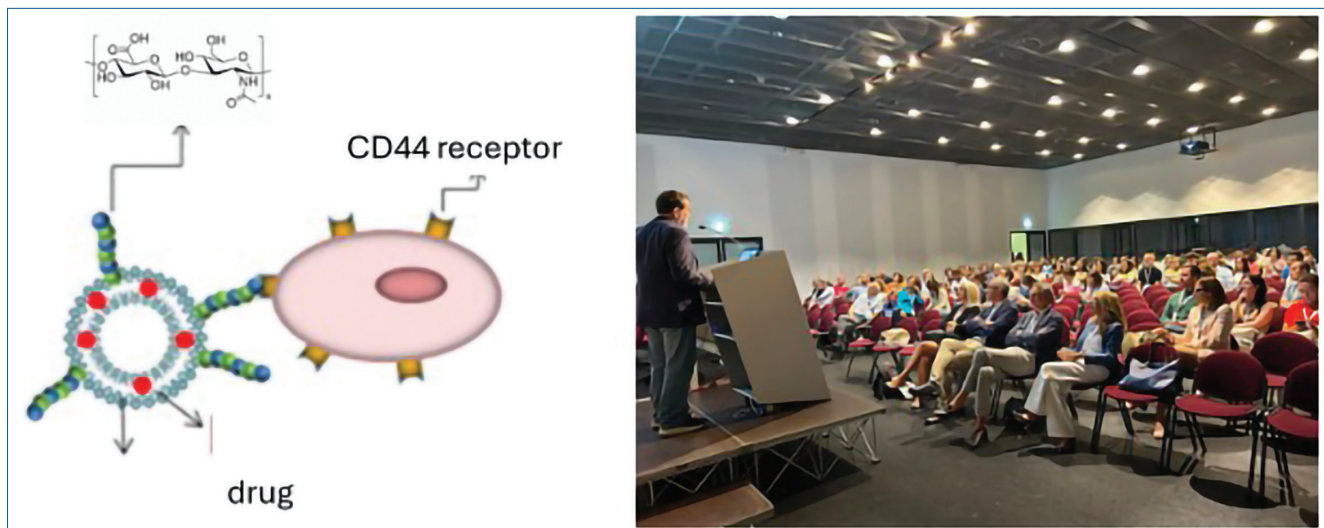


Fig. 3 - Meccanismo di targeting attivo mediato dall'acido ialuronico, biomateriale che viene riconosciuto specificamente dalle cellule tumorali che sovraesprimono il recettore CD44, oggetto della relazione del prof. Tirelli (nella foto)

multidisciplinare per lo sviluppo di sistemi terapeutici per una medicina sempre più mirata e precisa è stato presentato dai professori Francesca Mastrotto e Giovanni Marzaro dell'Università di Padova nel secondo *joint talk* della sessione. Nella loro presentazione è emerso come ambiti scientifici apparentemente simili, come la chimica farmaceutica e la tecnologia farmaceutica, siano di fatto portatori di competenze diverse ma complementari e come dal confronto di visioni diverse basate su conoscenze consolidate possa nascere un'idea di successo. Se ne trae l'insegnamento che è sempre più produttiva la collaborazione con esperti più che la tentazione di una ricerca autarchica. Nell'esempio riportato, la collaborazione dei due settori ha portato alla realizzazione di un sistema colloidale per il *targeting* di cellule che sovraesprimono il recettore CCK-2. La combinazione delle competenze di design *in silico* e sintesi di specifici *linker* e della progettazione e caratterizzazione biofarmaceutica dei sistemi colloidali di veicolazione di farmaci ha permesso di individuare e ottimizzare gli elementi rilevanti per l'ottenimento di un sistema terapeutico altamente efficiente. Un aspetto importante affrontato durante la sessione è stato l'impiego di biomateriali con specifiche caratteristiche chimico-fisiche, biofarmaceutiche e biologiche nello sviluppo di prodotti per la medicina di precisione. Tra questi uno dei più importanti è l'acido ialuronico, un polisaccaride che costituisce uno degli elementi strutturali fondamentali per i tessuti biologici ma che svolge anche un'azione biologica specifica come mediatore di attività cellulare. Il prof. Nicola Tirelli dell'Istituto Italiano di Tecnologia ha illustrato le

singolari caratteristiche dell'acido ialuronico in funzione del controione che lo rendono un biomateriale unico nel suo genere, in grado di acquisire specifiche strutture e proprietà che ne consentono un impiego per l'ottenimento di sistemi con sensibilità microambientale. Le specifiche proprietà biologiche dell'acido ialuronico sono ampiamente studiate per il targeting attivo di farmaci antitumorali al recettore CD44 (Fig. 3). La conoscenza dell'espressione e distribuzione cellulare nonché dei meccanismi di riconoscimento e internalizzazione cellulare è fondamentale per la costruzione di sistemi di *delivery* mirati. Nella sua relazione il prof. Tirelli ha riportato gli ultimi sviluppi della ricerca sui meccanismi di trasporto cellulare dell'acido ialuronico e del loro impiego nella produzione di sistemi per la veicolazione attiva dei farmaci.

La disponibilità di metodi diagnostici sensibili, accurati e selettivi costituisce un elemento chiave per la medicina di precisione. In questo contesto la professoressa Francesca Baldelli Bombelli del Politecnico di Milano ha presentato lo sviluppo e l'impiego di tecnologie diagnostiche basate su ^{19}F -MRI che, integrate con altre tecniche già consolidate (^1H -MRI, Raman e *fluorescence imaging*), consentono un'accurata localizzazione dei tessuti *target*, permettendo la progettazione di prodotti e protocolli terapeutici di precisione. PERFECTA è un esempio di un agente fluorinato con ^{19}F sviluppato per la diagnostica MRI. PERFECTA ha dimostrato un'elevata biocompatibilità e versatilità di impiego multiscala e multimodale. La tecnologia MRI può anche essere combinata con farmaci allo scopo di controllare in modo accurato e *on-time* la performance terapeutica di questi sistemi

grazie alla determinazione del loro profilo di distribuzione. Un particolare esempio di questa strategia terapeutica prevede la combinazione di un probe MRI con un sistema di *Boron Neutron Capture Therapy*, presentato dalla professoressa Simonetta Geninatti Crich dell'Università di Torino. L'uso nell'MRI dell'isotopo non radioattivo ^{157}Gd può produrre un'elevata intensità di elettroni LET Auger che migliora l'efficacia terapeutica del sistema. La combinazione di questi agenti diagnostici/terapeutici in sistemi di *delivery* colloidali può ulteriormente migliorarne l'efficacia modificandone il profilo farmacocinetico e l'*uptake* tumorale così come l'aggiunta di inibitori dell'anidrasi carbonica IX ha prodotto un miglioramento del sistema. L'impiego di questi sistemi ha prodotto risultati positivi anche nel trattamento dell'Alzheimer.

Un altro aspetto della diagnosi accurata e mirata a supporto della medicina di precisione è l'impiego di sistemi portabili in grado di fornire informazioni sia sulle specificità del paziente che quelle del prodotto terapeutico. I sistemi basati su elettrodi *screen-printed* presentati dal prof. Stefano Cinti dell'Università degli Studi di Napoli Federico II offrono un'interessante versatilità come sistemi diagnostici che impiegano acidi nucleici ed esosomi, come sistemi per la valutazione del caricamento di farmaci in sistemi colloidali di *drug delivery* e come sistemi di valutazione di efficacia di farmaci.

Lo sviluppo industriale di sistemi diagnostici impiegati nella medicina di precisione è stato presentato dal dottor Luciano Lattuada che ha illustrato le principali direzioni di Bracco Imaging, una grande azienda italiana leader in questo settore.

Oltre alle relazioni che hanno efficacemente dato uno spaccato rappresentativo dello stato dell'arte della ricerca chimica italiana nella medicina di precisione, la sessione ha voluto discutere di prospettive in un'ottica multidisciplinare fornita da esponenti delle diverse Divisioni coinvolte nell'organizzazione. Hanno infatti animato la discussione Francesca Baldelli Bombelli, Walter Cabri, Luciano Lattuada, Nicola Tirelli e Barbara Valsasina. La tavola rotonda, a dimostrazione della missione della Società Chimica Italiana che vuole guardare al futuro, ha anche visto la partecipazione di due giovani ricercatrici, la dottoressa Chiara Borsari della Divisione di Chimica Farmaceutica e la dottoressa Camilla Pozza, della Divisione di Tecnologia Farmaceutica. Provenienti sia dall'industria che dal mondo accademico e degli enti di ricerca, i relatori hanno apportato alla discussione interessi scientifici diversi ed anche prospettive intersettoriali.

Il *panel* ha confermato il ruolo centrale della chimica nel raggiungimento degli obiettivi della medicina personalizzata, soffermandosi non solo sui suoi fondamenti teorici, ma anche sulle tendenze attuali e sulle sfide future. In maniera unanime è stata ribadita l'importanza di una prospettiva interdisciplinare che la comunità chimica può e deve adottare per sviluppare prodotti innovativi per la salute, la farmaceutica, la diagnostica e i materiali ad alta tecnologia, enfatizzando la natura intrinsecamente collaborativa della ricerca sulla medicina di precisione. Il dibattito è stato particolarmente vivace anche su argomenti "fuoritema", come le possibilità di carriera e le scelte lavorative per i giovani e le giovani chimici e chimiche in questo ed altri ambiti affini.

I contributi scientifici alla sessione Health hanno evidenziato i numerosi aspetti della medicina di precisione, dall'individuazione di target farmacologici selettivi, alla valutazione dei fattori genetici che sono alla base dello sviluppo di patologie, la necessità di tecniche strumentali accurate non solo per la diagnosi ma anche per la valutazione in *real-time* del profilo *in vivo* dei medicinali e della performance terapeutica dei farmaci, e, infine, l'importanza dello sviluppo di farmaci e sistemi terapeutici sempre più selettivi e personalizzati. Ne risulta come la medicina di precisione rappresenti effettivamente l'aspetto più avanzato della ricerca a supporto della salute dell'uomo e dell'animale. È evidente come questo settore sia caratterizzato da un'elevata finalità applicativa e dalla necessità di una forte complementarietà di conoscenze interdisciplinari che spaziano dalle discipline biomediche a quelle chimico-tecnologiche, fisiche e matematiche. La chimica, nelle sue varie declinazioni, ha un ruolo centrale in tutti gli aspetti dello sviluppo della medicina di precisione. Ogni ambito della chimica è quindi chiamato a portare le proprie specifiche competenze e contribuire alla ricerca e allo sviluppo di sistemi terapeutici sempre più personalizzati, ma anche sempre più accessibili a tutte le fasce sociali.

Chemistry and Precision Medicine in Italy

Precision Medicine represents an exciting new research endeavour with the potential to transform the way we enhance health and treat diseases. The Precision Medicine approach presents numerous opportunities to advance the field of chemistry, which in turn can contribute significantly to achieving its objectives by integrating diverse expertise and perspectives.

La combinazione tra prestazioni di scansione e libertà di applicazione



ZEISS Axioscan 7

Digitalizzate i vostri campioni con Axioscan 7, il metodo affidabile e riproducibile per creare vetrini per la microscopia virtuale di alta qualità. Axioscan 7 presenta caratteristiche eccezionali: elevata velocità di digitalizzazione, eccellente qualità d'immagine e impareggiabili modalità di imaging, tutto in un unico sistema completamente automatizzato e facile da usare.

Un potente hardware e un ricercato software supportano le più complesse attività di ricerca e le applicazioni quotidiane di scansione. Grazie all'elevata velocità di scansione potete creare in pochi attimi vetrini virtuali di qualità, sia in campo chiaro, sia in fluorescenza che in luce polarizzata.





Elisabetta Zendri
Dipartimento di Scienze Ambientali, Informatica e Statistica
Università Ca' Foscari di Venezia
elizen@unive.it

LA CHIMICA PER IL PATRIMONIO CULTURALE

La sessione 'Cultural Heritage' è stata progettata per offrire ai partecipanti alcuni interventi emblematici sul contributo della chimica alla conoscenza e alla conservazione del patrimonio culturale. Sono stati individuati quattro temi che hanno dato una visione della ricchezza di questo settore di ricerca, evidenziandone anche gli sviluppi futuri.

Il rapporto tra scienza e patrimonio culturale è di lunga data e già a partire dal XVIII secolo si svilupparono ricerche sulla caratterizzazione dei materiali e proposte di metodologie per la loro conservazione [1]. Tra la fine del XIX e l'inizio del XX secolo gli studi degli effetti dell'inquinamento ambientale sulle superfici architettoniche e sulle superfici pittoriche misero in risalto il rapporto tra l'ambiente di conservazione e i materiali, così come evidenziarono la necessità di intervenire con metodologie adeguate per conservare i manufatti e prevenire ulteriori danni. Nel corso degli ultimi decenni la scienza per il patrimonio culturale si è arricchita di nuove metodologie di studio e di approcci in linea con le esigenze attuali, quali la sostenibilità ambientale e i rischi derivanti dai cambiamenti climatici.

A ribadire il contributo della chimica alla salvaguardia del patrimonio culturale, la Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali ha organizzato all'interno del Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2024 la sessione "Cultural Heritage", strutturata con l'obiettivo di illustrare i più recenti risultati scientifici in questo settore anche ai "non addetti ai lavori".

La sessione ha proposto un modello consolidato di approccio alle problematiche relative alla conoscenza e alla conservazione del patrimonio culturale, basato sulla collaborazione interprofessionale e interdisciplinare, chiamando sia esperte ed esperti del mondo scientifico sia persone che operano all'interno delle istituzioni preposte a conservazione e salvaguardia del patrimonio. Le tematiche affrontate hanno riguardato alcuni ambiti specifici e, in particolare, quello archeologico, degli strumenti musicali antichi,

della diagnostica e della conservazione dei supporti cartacei.

Le quattro sessioni sono state introdotte da referenti di musei e centri di restauro per presentare le esperienze di cura e tutela del patrimonio culturale e lo stretto rapporto con l'ambito scientifico. A queste presentazioni sono seguiti gli interventi tenuti da esperte ed esperti chimici per illustrare il contributo di questa scienza alla soluzione di specifiche problematiche.

La sessione si è aperta con il primo tema relativo alla conservazione del patrimonio archeologico sommerso. Maria Luisa Saladino (Dipartimento STEBICEF, Università di Palermo) ha presentato le ricerche svolte in collaborazione con la prima Soprintendenza del Mare, istituita in Sicilia nel 2004, i cui compiti principali sono la tutela, la fruizione e la valorizzazione del patrimonio culturale subacqueo. Nel corso delle attività della Soprintendenza vengono recuperati dall'ambiente subacqueo numerosi materiali archeologici di notevole importanza, tra i quali manufatti metallici che rappresentano una sfida per l'e-



Fig. 1 - Indagini mediante spettroscopia XRF dei chiodi della nave punica conservata presso il Parco Archeologico Lilibeo-Marsala



sperto/a chimico a causa dei processi di corrosione che si verificano sia in ambiente marino che successivamente nell'ambiente di conservazione. La presentazione di alcuni esempi di indagine chimica, basate sull'applicazione di un approccio multianalitico (ICP-OES, ICP-MS, XRF, XRD) su diversi manufatti metallici [2, 3] ha illustrato, da un lato, i progressi relativi alla conoscenza dei fenomeni di corrosione in ambiente marino e, dall'altro, il contributo delle indagini alla ricostruzione della storia di questi oggetti (Fig. 1).

Il tema della conservazione del patrimonio archeologico sommerso (UCH) è particolarmente complesso e oggetto della Convenzione UNESCO del 2021. Silvestro Ruffolo (Dipartimento DiBEST, Università della Calabria) ha illustrato, partendo dal progetto CoMAS (New materials and tools for improving the *in situ* documentation, restoration, and conservation of underwater archaeological remains) le nuove metodologie realizzate, in particolare per il contenimento e la prevenzione di *biofouling*, che rappresenta la forma di degrado più impattante sui materiali archeologici sommersi. Recenti studi su protettivi a base di nanoparticelle di ossido metallico (TiO_2 e Ag) disperse in cera silossanica applicabili sulle superfici lapidee direttamente sott'acqua hanno dato dei risultati significativi per la prevenzione di questa forma di degrado [4].

La conservazione delle strutture archeologiche subacquee riguarda anche la proposta di nuove malte con prestazioni meccaniche e antivegetative adeguate applicabili per la manutenzione di manufatti di diversa tipologia. In questo senso la ricerca ha messo a punto nuovi impasti con leganti aerei e idraulici caricati con addensanti organici e $\text{Mg}(\text{OH})_2$ in grado di conferire un comportamento pseudoplastico e caratteristiche antivegetative [5].

La seconda parte della sessione è stata dedicata alla conservazione dei violini storici.

Fausto Cacciatori (Museo del Violino, Cremona) ha introdotto il tema, sottolineando come gli strumenti ad arco ed i violini nello specifico siano particolarmente sensibili all'ambiente di conservazione. È inoltre da considerare che gli strumenti musicali storici spesso vengono utilizzati, aggiungendo un ulteriore potenziale effetto negativo sul loro stato. Le azioni preventive hanno quindi assunto nel tempo un

ruolo sempre più importante e, forte di un'intensa collaborazione con esperti scientifici, il Museo del Violino di Cremona si è dotato di un innovativo piano di monitoraggio non invasivo per verificare lo stato di conservazione degli strumenti nel tempo [6] ed ha messo a punto nuove pratiche di conservazione per garantire la durabilità di questo patrimonio unico nel suo genere.

La sonorità di questi straordinari strumenti dipende, oltre che da una conservazione ottimale, anche dalle vernici applicate, come riportato da Marco Malagodi (Dipartimento di Musicologia e Beni Culturali, Università di Pavia), che ha presentato i recenti risultati sull'identificazione delle tecniche costruttive e sui materiali utilizzati da importanti liutai, quali Stradivari e Guarneri. Tecniche spettroscopiche, di imaging e la luce di sincrotrone hanno permesso di caratterizzare le vernici originali e gli strati di preparazione, strati spesso composti da diversi materiali organici e inorganici variamente miscelati e sovrapposti. Le tecniche d'indagine proposte ultimamente, non invasive e microinvasive (XRF, EDX, FTIR) vengono integrate, quando possibile, con quelle di imaging, Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) e di Tomografia a Coerenza Ottica (OCT), consentendo l'analisi di strati particolarmente sottili, dell'ordine di poche decine di micron (Fig. 2) [7].

Quanto possa influire la scelta dei materiali ed il loro assemblaggio sulla sonorità di uno strumento è stato argomento dell'intervento di Raffaele Malvermi (Dipartimento di Elettronica, Informazione e Bioingegneria, Politecnico di Milano) che ha illustrato l'influenza delle tecniche costruttive sui modi di vibrazione della tavola armonica. Le variazioni di densità del legno, dovute a trattamenti preliminari di stuccatura o all'applicazione di adesivi con caratte-

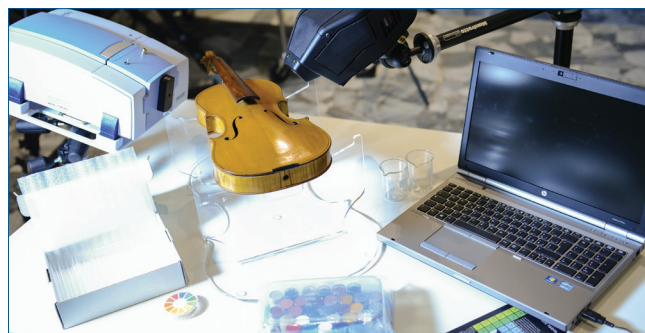


Fig. 2 - Analisi non invasive di spettrometria FTIR in riflettanza e di fluorescenza ai raggi X su un violino

ristiche chimiche diverse da quelle originali hanno un'influenza decisiva sulla risposta acustica dello strumento che deve essere quindi monitorata nel corso di tutte le fasi dell'intervento conservativo [8].

La terza tematica affrontata nel corso della sessione ha riguardato i metodi di indagine non invasivi e micro-invasivi per la diagnostica applicata agli studi e alla conservazione del patrimonio culturale.

Lo sviluppo di nuove tecnologie e metodologie analitiche fornisce agli scienziati della conservazione strumenti essenziali per lo svolgimento di campagne diagnostiche a scopo conoscitivo e a supporto degli interventi di restauro. Federica Pozzi (Direttrice dei Laboratori Scientifici del Centro per la Conservazione ed il Restauro dei Beni Culturali "La Venaria Reale", Torino) ha illustrato, attraverso casi studio emblematici affrontati dal Centro nel corso degli anni, il ruolo cruciale della chimica, le sfide attuali e le opportunità di crescita nel campo della diagnostica per i beni culturali, sottolineando la necessità di mantenere vivo il dialogo tra i diversi saperi scientifici, tecnici e umanistici. La presentazione ha ripercorso alcune delle pietre miliari che negli ultimi decenni hanno rivoluzionato questo ambito, consentendo livelli di approfondimento senza precedenti nello studio tecnico-scientifico delle opere e nel monitoraggio del loro stato di conservazione e tra queste, l'introduzione di tecniche di imaging chimico e imaging 3D, l'integrazione di diverse tecniche analitiche all'interno della stessa unità strumentale e lo sviluppo di tecniche omiche. In tutti i contesti di analisi e studio, restano fondamentali la disponibilità di strumentazioni miniaturizzate per analisi non invasive e lo sviluppo di reti di collaborazione a livello nazionale e internazionale per una diagnostica accessibile e sostenibile. In termini di strumentazioni per la caratterizzazione dei materiali pittorici, già da tempo sono disponibili sistemi di chemical imaging operanti dai raggi X al SWIR (fino ai 2500 nm), ma esiste una certa carenza di sistemi che operino nel range del medio-IR, ad elevato potenziale diagnostico. Bruno Brunetti (Consorzio INSTM, Università di Perugia e Associato CNR-SCITEC) ha quindi illustrato un nuovo imager iperspettrale realizzato dalla Bruker, in collaborazione con CNR-SCITEC di Perugia, in grado di operare ad alta sensibilità in un ampio range, da circa 800 a 4000 cm^{-1} . Con questo nuovo sistema è possibile ottenere dati di distribuzione molecolare fortemente



Fig. 3 - Il sistema "Bruker HI90 modificato" durante una misura di imaging iperspettrale nel medio-IR sul dipinto di Pietro Perugino "Il martirio di S. Sebastiano" (1518), in restauro presso la Galleria Nazionale dell'Umbria

competitivi con quelli ottenibili, a parità di condizioni, con i sistemi a scansione, soprattutto nei termini di risoluzione laterale e tempi di acquisizione che si riducono da alcune ore a pochi minuti. Il nuovo imager è stato impiegato su un dipinto di Perugino in restauro presso la Galleria Nazionale dell'Umbria, consentendo sia la rivelazione di dettagli compositivi dei materiali originali e di alterazione del dipinto, sia il monitoraggio delle operazioni di pulitura con rimozione di vernici e ridipinture risalenti ai restauri precedenti (Fig. 3).

La conoscenza chimica dei leganti pittorici organici rappresenta tutt'ora una sfida a causa della loro complessa composizione e della suscettibilità ai processi di trasformazione nel tempo. Questi materiali sono spesso presenti in quantità molto ridotte rispetto ai materiali inorganici e un ruolo cruciale per la loro caratterizzazione lo svolgono le tecniche basate sulla cromatografia e sulla spettrometria di massa quali SIFT-MS (Selected-ion flow-tube mass spectrometry), EGA-MS (spettrometria di massa per analisi di gas evoluti), Py-GC-MS (gascromatografia-spettrometria di massa per pirolisi), GC-MS e



HPLC-MS. Maria Perla Colombini (Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa) ha presentato le attuali procedure analitiche basate sulle tecniche di cromatografia-spettrometria di massa che consentono la caratterizzazione delle macromolecole negli oggetti archeologici e nei dipinti, dimostrando la loro utilità nell'integrazione delle informazioni storiche e archeologiche [9, 10], oltre che nello studio dei processi di degrado a cui sono soggette.

Il quarto tema presentato ha riguardato le metodologie e le esperienze a confronto nel campo del restauro della carta.

Letizia Montalbano (Opificio delle Pietre Dure di Firenze) ha illustrato le importanti attività svolte in questo senso da questa istituzione autonoma del Ministero della Cultura italiano. Il Dipartimento di Conservazione della Carta e della Pergamena, in particolare, si occupa della conservazione e del restauro dei supporti tradizionali, tra cui disegni, stampe, cartoni preparatori e un'ampia gamma di oggetti decorativi in carta, nonché dei materiali di restauro e della loro possibile interazione. Molti sforzi sono stati rivolti alla ricerca di nuove metodologie per il consolidamento di supporti grafici (ad esempio carte moderne) e per la rimozione di macchie e di nastri adesivi invecchiati (pressure sensitive tape - PST), ampiamente utilizzati in passato per riparare pagine strappate o indebolite. Le nanotecnologie stanno oggi fornendo soluzioni innovative ed efficaci in questo senso, come ha illustrato Rodorico Giorgi (Università di Firenze & CSGI) documentando alcuni studi svolti in ambito di recenti progetti europei. Grazie a sviluppo e sperimentazione di nuovi organogel e idrogel altamente ritentivi e caricati con solventi *green* o con sistemi detergenti a base acquosa è ora possibile rimuovere i PST invecchiati in maniera controllata e completa dai supporti cartacei [11]. Lo sviluppo di procedure per ottenere nanoparticelle di amido Jin Shofu ha invece consentito di procedere al ricoesione di tecniche grafiche su disegni e stampe rispettando la loro natura opaca, che risulta tipicamente alterata per effetto dell'applicazione di materiali filmogeni sintetici o naturali [12].

Conclusioni

La nutrita partecipazione di pubblico alla sessione "Cultural Heritage" conferma l'elevato interesse a sviluppare un settore della chimica che, seppure an-

cora di nicchia, ha un rilevante complessivo impatto sia in termini culturali che economici.

Allo stato attuale i fronti di ricerca sono numerosi e la nostra comunità scientifica è sollecitata a dare risposte a problemi reali quali, ad esempio, la prevenzione del degrado a fronte di emergenze climatiche, la proposta di metodologie d'intervento a basso impatto ambientale e lo sviluppo di sistemi di monitoraggio applicabili su scala urbana. Le competenze in ambito chimico saranno sempre più indispensabili per dare risposte a queste esigenze, come ormai riconosciuto da tutta la filiera della conservazione dei beni culturali.

Bibliografia

- [1] P. Bensi, Memorie di scienze fisiche e naturali. Rendiconti della Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL, 2012, 135.
- [2] F. Armetta *et al.*, *Scientific Reports*, 2021, 11.
- [3] F. Armetta *et al.*, *Molecules*, 2023, **28**(4), 1968.
- [4] S.A. Ruffolo *et al.*, *Progress in Organic Coatings*, 2017, **104**, 64.
- [5] M. Ricca, S.A. Ruffolo *et al.*, *Nanomaterials*, 2022, **12**, 1498.
- [6] G.V. Fichera, M. Albano *et al.*, 4th Annual Conference COST FP1302 WoodMusIck, Musical Instruments Museum, Brussels October 5-7, 2017.
- [7] F. Poggialini, G. Fiocco *et al.*, *Journal of Cultural Heritage*, 2020, **44**, 275.
- [8] R. Malvermi, R. Gonzalez *et al.*, *Applied Sciences*, 2022, **12**(14), 7313.
- [9] A. Lluveras-Tenorio, S. Orsini *et al.*, *Microchemical Journal*, 2021, **170**, 106633.
- [10] J. La Nasa, I. Degano *et al.*, *Journal of Archaeological Science*, 2022, **141**, 105577.
- [11] A. Mirabile *et al.*, *Heritage Science*, 2020, **8**, 42.
- [12] A. Casini *et al.*, *Applied Materials and Interfaces*, 2021, **13**, 37924.

Chemistry and Cultural Heritage

The 'Cultural Heritage' session was designed to offer participants emblematic talks on the contribution of chemistry to the knowledge and conservation of cultural heritage. Four themes were identified that gave a vision of the richness of this research sector, also highlighting its future developments.



Vincenzina Barbera^a, Maurizio Galimberti^a, Mario Marchionna^b, Paolo Vacca^c

^aPolitecnico di Milano

vincenzina.barbera@polimi.it, maurizio.galimberti@polimi.it

^bSaipem SpA, Milano

mario.marchionna@saipem.com

^cSAES Getters SpA, Lainate (MI)

paolo_vacca@saes-group.com

INDUSTRY & TECHNOLOGY TRANSFER

La sessione tematica ha cercato di dipingere in maniera originale il cammino dell'innovazione verso l'applicazione, sia in una dimensione verticale del transfer tecnologico delle ricerche concepite e svolte nell'ambito dei centri di ricerca pubblici, che progrediscono verso lo sviluppo industriale, sia in una orizzontale dove gli sviluppi industriali sono descritti rispetto a svariati settori dell'industria tenendo presente anche l'interazione con startup e spin-off innovativi.

La sessione tematica “Industry & Technology Transfer”, svoltasi il 28 agosto nell'ambito di SCI 2024 con nutrita presenza di pubblico, è stata organizzata da molti organismi periferici della SCI, le Divisioni di Chimica Industriale e di Chimica per le Tecnologie, che gli autori del presente articolo rappresentano, le Divisioni di Chimica Fisica, Organica, Farmaceutica, Inorganica e degli Alimenti, e il Gruppo Interdivisionale di Risonanza Magnetica; questa ricchezza di contributi ha portato a offrire uno sguardo a 360° sulle tematiche riguardanti il passaggio dalla ricerca allo sviluppo fino a un'implementazione industriale.

La sessione ha, infatti, cercato di dipingere in maniera originale il cammino dell'innovazione verso l'applicazione, sia in una dimensione verticale del transfer tecnologico delle ricerche svolte nell'ambito dei centri di ricerca pubblici, che progrediscono verso lo sviluppo industriale, sia in una dimensione orizzontale dove le tematiche di sviluppo industriale sono descritte rispetto a svariati settori dell'applicazione chimica tenendo presente anche l'interazione con startup e spin-off innovativi.

La mattinata è stata principalmente dedicata al cammino della ricerca pubblica verso l'applicazione industriale e si è conclusa con una tavola rotonda che ha messo in evidenza le potenzialità, i problemi e le possibili soluzioni per un efficace transfer tecnologico, mentre il pomeriggio ha affrontato tematiche più prettamente industriali con il

contributo di aziende di natura assai variegata. La giornata si è conclusa con le premiazioni dei vincitori delle Medaglie Mario Giacomo Levi, dedicata alla collaborazione fra Università e Industria, e la Medaglia Paolo Chiusoli, entrambe della Divisione di Chimica Industriale. Malgrado i contenuti delle relative conferenze siano assai coerenti con la sessione stessa verranno pubblicati più estesamente in separata sede su *La Chimica e l'Industria*.

La sessione si è aperta con una conferenza plenaria di Maurizio Galimberti del Politecnico di Milano (Fig. 1), incentrata sul massimo esempio ottenuto



Fig. 1 - Conferenza plenaria di Maurizio Galimberti del Politecnico di Milano



dalla ricerca chimica italiana “*A Nobel Prize to shape our future. An example of Technology Transfer*”. La conferenza ha illustrato un modello di trasferimento tecnologico che ha visto Giulio Natta come protagonista, sia durante la collaborazione con Pirelli, che ha portato alla produzione di 1,3-butadiene e quindi di gomme stirene-butadiene a partire dall’etanolo da barbabietole, sia durante l’avventura della polimerizzazione stereospecifica con il polipropilene isotattico come esempio preclaro che ha portato al Premio Nobel. *Fil rouge* di questi esempi di successo sono stati, da un punto di vista scientifico e tecnico, il trasferimento da idee di ricerca solo *in nuce* alla realizzazione industriale su larga scala in tempi assai rapidi e, dal punto di vista organizzativo, la collaborazione profonda fra Università e Grande Azienda, con importanti e costanti finanziamenti da parte dell’impresa ed un grande numero di ricercatori industriali messi a disposizione dell’Università. Ma il vero *fil rouge* è stata la rilevante massa critica che ha consentito di realizzare rivoluzioni. È stato anche ricordato che la Società Chimica Europea ha assegnato nel 2023 al Politecnico di Milano ed al Max Planck Institut di Mülheim, dove lavorò Karl Ziegler, l’EuChem Award in riconoscimento di luoghi dove è stata fatta la storia della chimica.

“Technology Transfer” session

Elza Bontempi dell’Università di Brescia (Fig. 2) ha aperto la serie dei contributi provenienti dalla ricerca pubblica con la keynote “*Sustainability evaluation to support technological transfer: a case study*”, proponendo un interessante tool innovativo, ESCAPE, una Life Cycle Analysis “leggera” che permette di valutare rapidamente l’attrattività ambientale di nuove tecnologie, anche a basso TRL (Technology Readiness Level), permettendo il confronto con tecnologie di riferimento già commerciali, quindi assai utile in una fase di pre-sviluppo. Tale approccio è stato esemplificato nel caso della sintesi di nuovi materiali.

Letizia Bocchi, di Medica SpA, ha poi tenuto la comunicazione orale “*Development of innovative advanced materials for water remediation: research and business cooperation to deal with sustainability challenges*”: in cooperazione con il CNR, sono state sviluppate fino a scala industriale delle



Fig. 2 - Il contributo di Elza Bontempi dell’Università di Brescia

membrane, come polisolfone funzionalizzato con ossido di grafene, con elevata capacità di depurare acque contaminate.

Alberto Figoli, dell’Istituto per la Tecnologia delle Membrane del CNR (ITM) e co-fondatore e Scientific Advisor di WembraneX, ha tenuto la keynote “*WembraneX: the next generation of membranes for water treatment*” sullo sviluppo di questa startup nata nel 2023 come spin-off del CNR; l’idea era partita da ricerche condotte dal team del CNR-ITM in collaborazione con l’Università della Calabria e l’Università di Karlsruhe. La tecnologia, brevettata, si basa su un innovativo sistema di coating che può essere applicato su membrane commerciali già esistenti, migliorando significativamente la loro efficienza. Nello specifico, la membrana “Saftek”, prodotta da WembraneX, ha proprietà intrinseche anti-fouling ed antimicrobiche, è adattabile sulla base delle caratteristiche delle acque da depurare, ha prestazioni stabili nel tempo ed è realizzata con materiali sostenibili.

Stefano Antenucci di G.P.S. Tech Italia, uno spin-off dell’Università di Milano, ha presentato nella comunicazione orale “*G.P.S. Tech: dal bancone di laboratorio al mercato dei materiali innovativi*” l’esperienza recentemente maturata (a partire dal 2018) nel captare le necessità del mondo dei materiali andando a rispondere con la realizzazione di soluzioni nuove e all’avanguardia.

Ermelinda Falletta di VisioNing, nella comunicazione orale “*VisioNing: valorization of agro-industrial wastewater: from research bench to business*”, ha presentato l’esperienza di questo altro spin-off dell’Università di Milano, creato a valle di una meticolosa indagine delle sfide nel trattamento dell’acqua; combinando tecnologie bio-elettrochimiche e fotocatalitiche, la tecnologia permette non solo di purificare l’acqua ma anche di recuperare i preziosi nutrienti in essa contenuti.

Industry & Technology Transfer Roundtable

La tavola rotonda (Fig. 3) ha rappresentato un interessante momento di confronto fra i diversi attori (università, centri di ricerca pubblici, spin-off, startup, industrie e fondi di *venture capital*) coinvolti nel processo di *technology transfer* nel tentativo di capirne i fattori più premianti.

Martino di Serio dell’Università Federico II di Napoli ha introdotto la sessione riportando la sua esperienza con ISUSCHEM, startup innovativa e spin-off dell’Università Federico II, la cui attività è rivolta alla trasformazione di oli vegetali di scarto in solventi, fissanti ed emollienti rinnovabili ad alte prestazioni, perfetti per uso industriale. Lo sviluppo della tecnologia è ora a livello di pilota dimostrativo. La capacità di accedere a strutture pilota rappresenta spesso un aspetto critico per lo sviluppo delle ricerche; poter accedere a strutture



Fig. 3 - Industry & Technology Transfer Roundtable. Da sinistra a destra: Alberto Calvo (MITO Technology), Francesca Russo (WembraneX), Martino di Serio (Università Federico II di Napoli), Roberto Tiezzi (Università degli Studi di Milano)

specializzate e centralizzate faciliterebbe assai lo scale-up dei ritrovati.

Francesca Russo, sempre di WembraneX ha portato l’esempio concreto della startup già citata in precedenza, spiegando come la ricerca sviluppata al CNR si sia trasformata in un’impresa innovativa capace di attrarre investimenti importanti e sviluppare tecnologie industriali con impatto reale sul mercato.

Roberto Tiezzi, responsabile della Direzione “Innovazione e Valorizzazione delle Conoscenze” dell’Università degli Studi di Milano, ha sottolineato il ruolo strategico dell’Università nel cogliere le idee che nascono al suo interno e nel trasformarle in occasioni di innovazione per il territorio. Un focus particolare è stato dato al caso della rimozione del “professor privilege” in materia di brevettazione a livello universitario, in considerazione della recente novità legislativa; il ruolo dell’università diventa quindi ancora più rilevante come detentrica del patrimonio di proprietà intellettuale. Il risultato è la possibilità di poter più velocemente trasformare le idee innovative, sia attraverso la creazione di percorsi specifici (ad esempio Seed for Innovation di UniMI, ma anche S2P al PoliMI) che consentano alle idee innovative di farsi impresa, sia attraverso la collaborazione con grandi imprese realizzando piattaforme condivise di “open innovation”.

Infine, Alberto Calvo, socio di MITO Technology, società che ha lanciato “Progress Tech Transfer” il primo fondo di *venture capital* nato per sviluppare alcune delle più promettenti ricerche sviluppate nei centri di ricerca pubblici, e connotate da peculiari caratteristiche di sostenibilità, ha riportato alcuni esempi di investimenti del fondo fra cui la stessa tecnologia WembraneX, che nel 2020 è stata finanziata per un progetto *Proof of Concept* e successivamente, nel 2024, ha ottenuto un ulteriore investimento per espandere la sua attività a livello industriale.

È chiaro che gli sforzi per favorire il trasferimento tecnologico di queste ricerche sono ben lungi dall’essere ottimali e strutturali, ma si osservano decisi segnali di miglioramento rispetto a qualche anno fa, sia nella volontà di sviluppo da parte dei centri di ricerca pubblici che nella presenza di attori che aiutano a progredire gli sforzi per un effettivo sviluppo.



Industry session

La sessione si è aperta con la keynote lecture “*Technology innovation to enable polymer circularity: MoReTec, from inception to industrialization*” tenuta da Gabriele Mei di Basell Poliolefine: i rifiuti plastici costituiranno la nuova materia prima per le plastiche stesse e il loro riciclo chimico diventerà un passaggio ineludibile. La nuova tecnologia MoReTec, in via di sviluppo nel centro di Ferrara, si caratterizza per molti aspetti innovativi, fra cui quello dell'accoppiamento di un catalizzatore proprietario alla classica reazione di pirolisi, che permette di ottenere un prodotto più facilmente alimentabile allo steam cracking per rigenerare le olefine necessarie per produrre di nuovo il polimero. La tecnologia, a partire dai primi sviluppi in laboratorio dal 2018, è passata poi su scala pilota e nel 2023 è stata presa la decisione di realizzare un impianto industriale nel 2026.

Si è poi passati dal mondo della classica petrolchimica a quello dell'industria alimentare con la keynote lecture “*Corporate open innovation - Barilla case*”, tenuta da Claudia Berti di Barilla. Nel contesto di un'azienda alimentare, soggetta a costanti richieste di cambiamento della richiesta, l'open innovation, sia esterna che interna all'azienda, è una soluzione particolarmente utile. Barilla, già a partire dal 2011, è attiva in questo campo e ha costantemente progredito, creando anche un proprio fondo di *venture capital* e realizzando un programma specifico (*Good Food Makers*) che ha permesso di individuare a livello internazionale ben 22 startup. Paolo Vacca, di SAES Getters SpA (di seguito abbreviata come “SAES”), ha illustrato durante la sua keynote “*Technology Transfer for successful industrial development*” gli approcci di trasferimento tecnologico adottati da SAES nell'ambito di varie tipologie di iniziative di innovazione. Dalla sua fondazione, avvenuta ormai circa ottant'anni fa, SAES è stata costantemente impegnata in attività di ricerca radicale per sviluppare nuovi materiali e tecnologie, supportando una prospettiva innovativa di lungo termine attraverso processi interni. Negli ultimi quindici anni, SAES ha dato un particolare impulso alla diversificazione delle proprie piattaforme tecnologiche adottando diverse modalità di innovazione per mantenere la propria competitività in vari ambiti applicativi: i) acquisizione di tecnologia “inbound” da spin-off accademici e succes-

sivo sviluppo di una tecnologia innovativa basata su materiali nanostrutturati; ii) costituzione di una joint-venture focalizzata sullo sviluppo di una nuova tecnologia per applicazione in display di ultima generazione; iii) avviamento e partecipazione a progetti di R&D collaborativa con gruppi di eccellenza finalizzati allo sviluppo di nuovi processi; iv) investimento in accordi di sviluppo congiunto con aziende partner; v) avviamento di un hub ad alta tecnologia (RedZone) per startup focalizzate sullo sviluppo di materiali avanzati. Tra le diverse modalità di innovazione, particolare rilevanza è stata riposta allo sviluppo della piattaforma tecnologica delle zeoliti sintetiche iniziato con un technology transfer da una startup tedesca e proseguito con la creazione di un gruppo dedicato di R&D in grado di sostenere un'evoluzione da TRL3 a TRL9 e permettere oggi a SAES di sviluppare rapidamente additivi funzionali per diverse applicazioni industriali, dalla microelettronica, al packaging attivo, sino agli additivi per applicazioni cosmetiche. Infine, è stato descritto il programma RedZone con cui SAES sostiene lo sviluppo tecnologico di startup coinvolte su piattaforme per Materiali Avanzati ospitandole nei propri laboratori di Ricerca e garantendo loro supporto tecnico e attività di mentorship.

Ci si è poi spostati sull'ambito farmaceutico con la keynote “*Pharma innovation & business in Italy: nurturing potentials in an underestimated environment through EXTEND, a unique structured partnership between Academia, VC and Pharma*” di Antonio Felici di Evotec. La joint-venture EXTEND è stata formata da Evotec con Cassa Depositi e Prestiti e rappresenta un'iniziativa unica per accelerare lo sviluppo e la commercializzazione di ricerche sviluppate nei centri di ricerca pubblici nazionali per sbottigliarne le potenzialità nel campo della farmaceutica. Il fondo di *venture capital* permette sia il governo che il finanziamento di tali attività e favorisce la connessione fra i diversi centri di ricerca, le startup e l'industria sia nello scambio di conoscenze che in quello del vero e proprio sviluppo tecnologico.

Si è, infine, passati al campo energetico con due presentazioni orali di Eni, “*e-CCM Technology: transforming CO₂ into building materials*” di Paolo Cambise e “*Hydrotreated Vegetable Oils (HVO) derived from totally renewable feedstocks*” di Cor-

rado Fittavolini; nella prima è stata descritta una nuova tecnologia per la mineralizzazione della CO₂ con materiali alcalini a base di olivine, o simili, a dare un nuovo prodotto caratterizzato da originali caratteristiche pozzolaniche e applicabile nella formulazione di cementi, limitando la produzione di clinker, che presenta un'elevata impronta carbonica. Nella seconda presentazione si sono invece descritti i continui progressi di Eni nella produzione di biocarburanti, anche a partire da olii esausti di riciclo; il prodotto ottenuto presenta caratteristiche prestazionali eccellenti e consente una netta riduzione dell'impronta carbonica di questi carburanti.

In conclusione, in una giornata singola si sono compressi contenuti che potrebbero tranquillamente costituire un congresso a sé stante. Gli oratori si sono distinti per la loro eccellenza e per la diversità degli argomenti trattati, pur mantenendo tutti il filo comune del trasferimento delle ricerche verso un'applicazione industriale, adottando una gran varietà di approcci ma accomunati da una forte interdisciplinarietà sia degli attori coinvolti che dei contenuti. La chimica è infatti scienza che apre

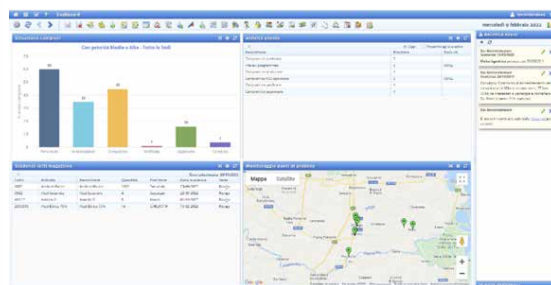
la porta verso variegate industrie e la capacità di portare a sviluppo tutto quello che viene maturato nei centri di ricerca pubblici rappresenta un enorme potenziale per il Paese.

Il risultato di questa sessione, originale anche perché non tradizionalmente configurabile nelle classiche attività della Società Chimica Italiana, e l'apprezzamento di chi vi ha partecipato, costituiscono un "incoraggiamento" per ulteriori iniziative nel campo... *see you soon!*

Industry & Technology Transfer

The thematic session had the ambition to figure, in an original way, the path of innovation moving towards application, both under a vertical dimension on the transfer of researches, conceived and carried out in public research centers, which are progressing towards the industrial development, and under an horizontal one where the industry developments are described with reference to several industrial sectors, taking also into account interactions with innovative startups and spin-offs.

Polisystem Informatica s.r.l.
Soluzioni Software per i Laboratori prove



ActiveLIMS®, il nuovo LIMS-Web di Polisystem Informatica srl, **Web "nativo"**, ma soprattutto **Innovativo ed User friendly**, progettato per soddisfare le esigenze di qualunque tipologia di Laboratorio.

- ▶ **Totale uniformità** della grafica
- ▶ **Schede video a sezioni**
- ▶ **Colonne configurabili, dimensionabili ed ordinabili**
- ▶ **Memorizzazione del Layout di ogni singolo utente**
- ▶ **Schede Video a Visualizzazione completa o con apertura del Dettaglio**
- ▶ **Criteri di selezione memorizzabili**
- ▶ **Wizards**
- ▶ **Dashboard composta da Widget configurabili**
- ▶ **Sicurezza** è la chiave di tutto il sistema
- ▶ **Log ed Audit Trail configurabili e consultabili secondo viste e prospetti personalizzabili**



SCOPRI DI PIÙ

MODULO BASE

Specifiche / Contratti	Accettazione / Lotti Ispettivi	Fogli di Lavoro - Input dati	Automazione Calcoli - SOP Logiche Formule	Controllo S.A.L. Campioni	Verifica / Approvazione / Firma Dig.	Risultati (RdP / CoA)	Log - Audit Trail	Gestione Documenti	Email Integrate
------------------------	--------------------------------	------------------------------	---	---------------------------	--------------------------------------	-----------------------	-------------------	--------------------	-----------------



Maintenance, ready, go!

With the new GCMS-QP2050, you can save a lot of maintenance time: Thanks to ion source maintenance, it takes less than a minute and the instrument is ready to start again. Beyond that, it's highly durable due to a long-life filament lasting about five times longer than usual.

Minimum maintenance

Simple and time-saving replacement of the ion source

High durability

Filament with a five times longer operating life than normal

Efficient workflow

Smart SIM™ automatically selects the optimal analysis method





Michela Signoretto^a, Paolo Fornasiero^b, Rinaldo Psaro^c

^aDipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi, Università Ca' Foscari Venezia

^bDipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste

^cCNR - Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche "Giulio Natta", Milano

CATALISI

La giornata dedicata alla catalisi ha avuto il contributo di tre keynote dall'industria (Polynt Group, Eni e Basell Poliolefine Italia Srl), delle conferenze dei vincitori di: Medaglia Mangini, Premio GIC Grasselli e Chini Lecture, e di alcune selezionate comunicazioni orali. Si sono anche tenute due stimolanti tavole rotonde sui contributi della catalisi per la transizione energetica e lo sviluppo sostenibile.

Mercoledì 28 agosto 2024, nel corso del XXVIII Congresso della Società Chimica Italiana, giornata dedicata alle sessioni parallele, la numero 7 è stata interamente dedicata alla catalisi. La mattinata è stata organizzata dalla Divisione di Chimica Industriale (delegati Michela Signoretto e Rinaldo Psaro), e la sessione pomeridiana è stata curata dalla Divisione di Chimica Inorganica (delegato Paolo Fornasiero). Ai fini della definizione del programma hanno inoltre partecipato i delegati delle seguenti divisioni: Chimica Teorica (Giovanni Di Liberto), Chimica Organica (Enrico Marcantoni), Chimica Ambientale e dei Beni Culturali (Davide Vione), Chimica per le Tecnologie (Maria Michele Dell'Anna e Gianguido Ramis), e dei gruppi interdivisionali: Chimica organometallica (Walter Baratta), Green Chemistry - Chimica Sostenibile (Carmine Capacchione e Federica Zaccheria).

La struttura della giornata ha previsto delle keynote di esperti industriali, delle assegnazioni di premi relativamente allo sviluppo di catalizzatori e processi catalitici e di selezionate comunicazioni, nonché di due tavole rotonde. Un programma molto denso sui vari aspetti della catalisi con importanti indicazioni sulle sfide su cui la ricerca di base e applicata dovrà cimentarsi con successo per il bene della collettività.

La sessione della mattinata (chairman Marcella Bonchio) è iniziata con la premiazione di Valeria Conte dell'Università di Roma Tor Vergata, vincitrice della prestigiosa medaglia d'oro Angelo Mangini. Nel suo intervento dal titolo *"The Oxygen Paradox, a lifelong challenging dance"*, l'oratrice ha ripercorso la sua carriera scientifica in cui si è occupata principalmente dell'ossidazione di

composti organici con composti perossidici e metallo perossidici derivanti da acqua ossigenata o idroperossidi alchilici in presenza di ioni metallici di transizione in elevato stato di ossidazione. In particolare, la sua attività di ricerca si è focalizzata sulla comprensione dei meccanismi di reazione, sia eterolitici che omolitici. Più recentemente i suoi interessi si sono concentrati sullo studio delle proprietà e della reattività di sistemi ossidanti basati su perosso-complessi di vanadio, in soluzione acquosa, poiché tali sistemi rivestono un notevole interesse dal punto di vista biologico. Da anni si interessa anche di temi di ricerca vicini alla chimica sostenibile, in particolare di nuove molecole organiche policicliche di sintesi, studiate per le interessanti proprietà fotochimiche, elettroniche ed elettrochimiche in soluzione e depositate su superfici metalliche o semiconduttrici.

Tommaso Tabanelli ha presentato la prima keynote della mattina a cura di Carlotta Cortelli di Polynt Group dal titolo *"Contribution of catalysis and process optimization to improve sustainability in thermoset materials"*. Tra i polimeri termoindurenti, le resine poliestere insature sono i polimeri più importanti utilizzati nella produzione di articoli fibro-rinforzati. Due materie prime molto importanti sono le anidridi maleiche e ftaliche, prodotte industrialmente da reazioni di ossidazione catalizzata in fase gassosa di *n*-butano e *o*-xilene. Anche se i processi industriali per la produzione delle anidridi sono ben consolidati e utilizzati in tutto il mondo da decenni, si cercano miglioramenti continui e incrementali nelle prestazioni dei catalizzatori per migliorare i rendimenti del processo e contemporaneamente diminuire le emissioni di CO₂, riducen-



do così l'impronta di carbonio dell'intera catena di produzione dei materiali compositi. Parallelamente, le attività di ricerca si concentrano sull'utilizzo di materie prime rinnovabili e sullo sviluppo di processi a basso consumo energetico per migliorare ulteriormente la sostenibilità di questi monomeri. È importante sottolineare che nello sviluppo di nuove soluzioni, la disponibilità e il costo delle materie prime rinnovabili, così come i costi di investimento necessari per implementare nuovi processi sostenibili, devono essere considerati con attenzione, in quanto potrebbero rappresentare delle barriere al raggiungimento degli obiettivi di sostenibilità.

Elena Groppo ha presentato le due comunicazioni tenute rispettivamente da Nicola Di Fidio (Università di Pisa), con *"Chemical and enzymatic hydrolysis of waste wheat bran to sugars and their simultaneous biocatalytic conversion to valuable carotenoids and lipids"*, e da Nicoletta Rusta (Università di Cagliari), con *"Cerium Oxide-based catalysts for direct synthesis of dimethyl carbonate from methanol and CO₂"*.

Si è quindi passati alla premiazione del premio GIC 2024 intitolato alla memoria del Prof. Robert K. Grasselli, durante la quale il coordinatore del Gruppo di Catalisi Alessandro Trovarelli ha invitato Eva-Maria Hauck Grasselli, che dal 2020 per

onorare la memoria del marito sostiene finanziariamente il premio, alla consegna delle targhe ai vincitori: Gianvito Vilè del Politecnico di Milano e Andrea Fasolini dell'Università di Bologna (Fig. 1). Federica Menegazzo ha brevemente illustrato la carriera scientifica di Grasselli e ha invitato i due vincitori a presentare i risultati delle loro ricerche in catalisi. Vilè ha esposto la relazione dal titolo: *"Single-atom catalysis for greener chemical synthesis"*, a seguire Fasolini con l'intervento: *"Ce and Zr based oxides as useful supports and materials for gas phase H₂ production and utilization"*.

Rinaldo Psaro ha introdotto la seconda keynote a cura di Roberto Millini di Eni dal titolo: *"CO₂: from a waste to a resource in the energy sector"*. L'obiettivo emissioni zero è molto impegnativo, soprattutto se si considera che la principale fonte di CO₂ è il settore energetico che, nel 2022, era responsabile delle emissioni di 36,8 Gtonn CO₂, l'1% in più rispetto al livello pre-COVID. Per raggiungere questo obiettivo, è necessario mettere in atto azioni che portino alla progressiva riduzione dell'uso delle fonti fossili: l'aumento dell'efficienza energetica, lo sviluppo delle fonti rinnovabili, l'elettificazione dei trasporti e degli edifici sono tra le azioni più richieste, ma queste necessitano di un radicale adeguamento delle infrastrutture, lungo e costoso.

Per questo motivo, gli scenari attribuiscono un ruolo importante alla cattura e allo stoccaggio del carbonio (Carbon Capture Utilization and Storage, CCUS), cioè alle modalità che prevedono la limitazione delle emissioni di CO₂ attraverso la sua cattura, ad esempio dai gas di scarico, e il sequestro permanente in formazioni geologiche adeguate (CCS) o il suo utilizzo per la produzione di beni o servizi con valore di mercato (CCU). A questo proposito, il riutilizzo della CO₂ come fonte di carbonio sta attirando sempre più attenzione e ampie attività di ricerca e sviluppo si stanno concentrando sulla sua conversione in materiali da costruzione, polimeri e prodotti chi-



Fig. 1 - Premiazione Grasselli GIC2024, da sx: Gianvito Vilè, Eva-Maria Hauck Grasselli e Andrea Fasolini

mici, carburanti sintetici sostenibili (e-fuels), questi ultimi con un impatto diretto sul settore energetico. In particolare, gli e-fuels sono destinati a svolgere un ruolo nel settore dei trasporti, soprattutto per i cosiddetti segmenti difficili da abbattere, l'aviazione e la marina, per i quali l'elettrificazione e l'uso dell' H_2 sono complessi, almeno nel medio-lungo termine. Gli e-fuels hanno caratteristiche molto simili ai corrispondenti combustibili fossili e questo li rende compatibili sia con le infrastrutture di trasporto, distribuzione e stoccaggio esistenti, sia con i motori attuali. Gli e-fuels, sia gassosi (metano) che liquidi (metanolo, dimetiletere, benzina, diesel, jet fuel), sono prodotti mediante riduzione diretta o indiretta della CO_2 catturata da fonti concentrate (ad esempio, gas di scarico), dall'aria (Direct Air Capture, DAC) o di origine biogenica (ad esempio, dal biogas). Per la riduzione della CO_2 a combustibile, sono necessari anche H_2 verde proveniente dall'elettrolisi dell'acqua ed energia elettrica rinnovabile.

Denominatore comune degli interventi della giornata è stato l'impiego di approcci catalitici efficienti in grado di favorire al meglio la transizione verso l'economia circolare contestualizzata nel complesso panorama energetico attuale. In questa direzione è andata la discussione della tavola rotonda intitolata "Biomass and decarbonisation: challenges and opportunities in energy transition" che ha concluso nel migliore dei modi la sessione. Tra gli invitati

Fabrizio Cavani (Università di Bologna), Carlotta Cortelli (Polynt), Isabella De Bari (Enea), Federica Zaccheria (CNR-SCITEC), che si sono confrontati sulle principali sfide relative all'impiego di biomasse e materie prime di scarto per la produzione di energia nell'ottica della decarbonizzazione. I moderatori della tavola rotonda sono stati Michela Signoretto (ex coordinatrice del Gruppo di Catalisi) e Alessandro Trovarelli. La discussione aperta al pubblico in sala è stata coordinata da Gianguido Ramis (Università di Genova) (Fig. 2).

Questa prima parte della sessione dedicata alla catalisi ha, dimostrato, ancora una volta che la sinergia ed il confronto tra accademia ed impresa, la diversificazione degli approcci e la creazione di un ecosistema favorevole, dato dall'interazione e dal dialogo tra tecnici, scienziati, parti sociali, istituzioni ed industria, sono indispensabili per affrontare criticità e precarietà del momento storico che stiamo vivendo.

La sessione pomeridiana si è aperta con una tavola rotonda che combinava aspetti legati all'utilizzo dei "critical raw materials", lo sviluppo dei catalizzatori di tipo "single atom" e di quelli "metal free" all'uso dell'intelligenza artificiale in catalisi, per finire con le prospettive legate all'utilizzo della luce nella promozione delle reazioni chimiche.

La sessione ha attirato e coinvolto un ampio pubblico in una stimolante discussione con colleghi di primissimo piano scientifico. Erano infatti presenti Silvia Bordiga (Università di Torino ed Accademia dei Lincei), Gianfranco Pacchioni (Università di Milano Bicocca ed Accademia dei Lincei), Maurizio Prato (Università di Trieste, CIC biomaGUNE ed Accademia dei Lincei) ed Elena Selli (Università di Milano), i quali, stimolati da alcune considerazioni dei due coordinatori, Mario Chiesa (Università di Torino) e Paolo Fornasiero (Università di Trieste), sono riusciti a proporre punti di vista complementari, mai banali e supportati da personali esperienze concrete a partire dalla loro visione di una road map per la catalisi dei prossimi 10 anni, con un'analisi dei principali processi e delle sfide più rilevanti.

Il pubblico si è poi dimostrato attento, partecipativo e, a volte, anche costruttivamente critico quando sono stati affrontati temi attuali e controversi, quali la reale possibilità di sintetizzare catalizzatori reali con un vero approccio di progettazione con-

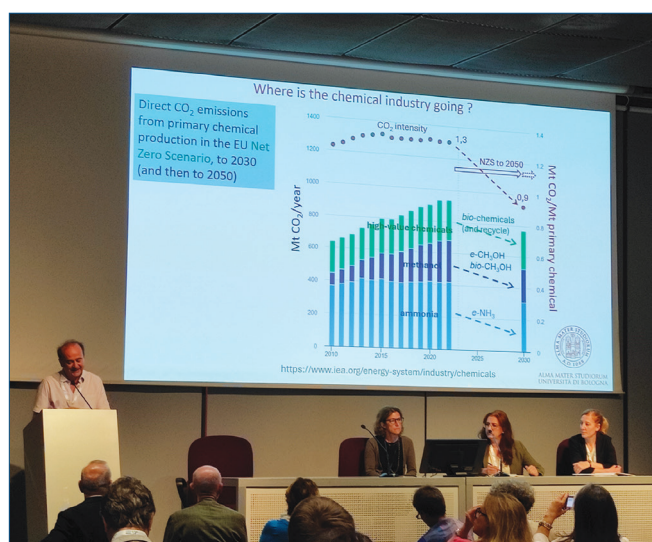


Fig. 2 - Tavola Rotonda, da sx: Fabrizio Cavani, Federica Zaccheria, Isabella De Bari, Carlotta Cortelli



Fig. 3 - Premiazione Chini Lecture di Vincenzo Busico da parte di Alceo Macchioni della Divisione di Chimica Inorganica

trollata. L'implementazione su scala industriale di metodi sintetici tipicamente limitati a sistemi modello o ideali richiede, evidentemente, di rafforzare la sinergia tra teoria ed esperimento, aprendo la strada per possibili e ancora non scontate o tutt'altro che ovvie applicazioni dell'intelligenza artificiale. Il problema di affidabilità e riproducibilità dei dati, in particolare nel campo della fotocatalisi eterogenea, ha suscitato notevole attenzione.

Barbara Milani (Università di Trieste) ha introdotto la keynote lecture di Ugo Visentini di Basell Poliolefine Italia Srl dal titolo: "Ziegler Natta Catalyst: 70 years of continuous advancement" che ha visto una rivisitazione in chiave moderna con prospettive attuali e importanti riflessi sul futuro, della catalisi di polimerizzazione applicata alla sintesi di poliolefine, di cui l'azienda è punto di riferimento a livello mondiale. Le prospettive future hanno in particolare riguardato l'importante impegno di LyondellBasell nel riciclo delle materie plastiche. In questo contesto è stata illustrata l'innovativa tecnologia di depolimerizzazione alla base del processo MoReTec, i cui studi, iniziati nel sito di Ferrara nel 2018, e dopo la sperimentazione dell'impianto pilota, hanno portato l'azienda a decidere sulla costruzione del primo impianto di riciclo avanzato che verrà aperto nel 2025 in Germania, presso la sede di Wesseling.

In stretta connessione con la tematica, ma con un taglio più accademico, si è inserita la prestigiosa

Chini Lecture di Vincenzo Busico dell'Università Federico II di Napoli (Fig. 3) dal titolo "Ziegler-Natta Catalysis: a journey in the land of serendipity". L'intervento è stato introdotto da Alceo Macchioni dell'Università di Perugia. L'oratore ha ripercorso la sua carriera scientifica in cui si è occupato di catalisi di polimerizzazione rivolta, in particolare, alla sintesi stereocontrollata delle poliolefine. Gli sviluppi più recenti della sua ricerca riguardano l'applicazione della robotica alla catalisi di polimerizzazione con l'uso di *high throughput experimentation* quale strumento di grande efficacia per la scoperta di nuovi catalizzatori.

Giovanni Di Liberto e Rinaldo Psaro si sono alternati nella presentazione delle ultime quattro comunicazioni tenute rispettivamente da Umberto Raucci (IIT): "Unravelling the complex dynamical behavior of heterogeneous catalysts during reactants exposure"; da Tiziano Montini (Università di Trieste): " H_2 production by ethanol dehydrogenation on metal doped $ZnIn_2S_4$ photocatalysts"; da Maria Michela Dell'Anna (Politecnico di Bari): "A virtuous cycle of wastes: iron oxides supported on steel slags as catalyst for the hydrogenation of nitroarenes"; da Samir Bensaid (Politecnico di Torino): "Effect of pre-treatment conditions on Fe-based catalyst for e-fuel production via modified Fischer-Tropsch synthesis".

A conclusione di questa intensa giornata, che ha visto la partecipazione del mondo accademico e industriale, rispetto alla domanda iniziale 'Quale futuro per la catalisi?', si può affermare che il settore della catalisi è ancora caratterizzato da una notevole capacità di innovazione e deve essere considerata uno degli elementi strategici dello sviluppo sostenibile.

Catalysis

The catalysis day had the contribution of three keynotes from industry (Polynt Group, Eni and Basell Poliolefine Italia Srl), the Mangini Medal, Grasselli GIC Award and the Chini Lecture, and selected oral communications. There were also two stimulating panel discussions on the contributions of catalysis for the energy transition and sustainable development.


 Ugo Cosentino^a, Mariano Venanzi^b
^aUniversità degli Studi di Milano Bicocca

^bUniversità degli Studi di Roma "Tor Vergata"

INSEGNARE, APPRENDERE E COMUNICARE LA CHIMICA

La sessione tematica “Chemical Education, Communication and Outreach”, organizzata con il contributo di tutte le Divisioni e i Gruppi Interdivisionali della SCI, ha affrontato il tema dell’insegnamento e dell’apprendimento della Chimica, discutendo di metodologie didattiche e nuove tecnologie nell’ambito della scuola e dell’università, e il tema della comunicazione della Chimica al vasto pubblico.

La sessione tematica “Chemical Education, Communication and Outreach”, svoltasi nell’ambito del XXVIII Congresso della Società Chimica Italiana, è stata realizzata con il contributo di tutte le Divisioni e i Gruppi Interdivisionali della società. Il tema dell’insegnamento e dell’apprendimento della Chimica a tutti i livelli dell’istruzione, dalla scuola all’università, così come quello della sua comunicazione al vasto pubblico, costituiscono, infatti, un argomento centrale e trasversale a tutti i settori e ambiti della Chimica.

La sessione, che ha visto in tutto l’arco della giornata una considerevole e significativa partecipazione di pubblico, si è posta l’obiettivo di mettere in evidenza i punti di contatto e le differenze che caratterizzano i due temi: quello dell’insegnamento/apprendimento (“Insegnare e apprendere la Chimica”) e quello della comunicazione/divulgazione (“Comunicare e divulgare la Chimica”). La mattina è stata dedicata principalmente al tema dell’insegnamento, mentre nel pomeriggio il focus ha riguardato prevalentemente quello della comunicazione.

Insegnare e apprendere la Chimica

Nell’ambito dell’insegnamento della Chimica, si è voluto approfondire la relazione esistente fra metodologie e tecnologie didattiche innovative, entrambe volte a porre al centro dell’analisi lo studente e il processo di apprendimento che lo studente compie. Il primo intervento della mattina è stato tenuto da Massimo Trotta del CNR-IPCP di Bari, con il titolo

“Finding Common Ground: A Modest Proposal for Effective Chemistry Communication Beyond Chemophilia and Chemophobia” (Fig. 1). Trotta ha esplorato la coesistenza, nelle società moderne, tra i sostenitori delle teorie del complotto, ad esempio quelli sulle scie chimiche, e gli appassionati di scienza. Ha evidenziato come la chemofobia, alimentata da disastri industriali, abbia eroso la fiducia nella Chimica, creando malintesi e polarizzazione nei dibattiti pubblici. Tuttavia, eventi come la Notte Europea dei Ricercatori dimostrano



Fig. 1 - Intervento di Massimo Trotta



l'importanza della divulgazione scientifica nel ricostruire tale fiducia, sottolineando i benefici tangibili della Chimica nella vita quotidiana. Trotta ha proposto un approccio comunicativo che metta in luce la complessità della Chimica, enfatizzandone i progressi e la valenza culturale, senza nascondere i rischi e l'impatto socio-economico, evitando di spingere il pubblico verso una visione estrema e polarizzata.

Successivamente, Paolo Grieco dell'Università di Napoli Federico II ha parlato di *"Metaversity, a Place where Education, Communication, and Outreach are Innovative"*, descrivendo come le tecnologie del metaverso stiano rivoluzionando l'educazione e la comunicazione scientifica. L'accessibilità delle realtà virtuale (VR) e aumentata (AR) ha aperto nuove opportunità per l'insegnamento, creando ambienti di apprendimento coinvolgenti, sia dal punto di vista motivazionale, che cognitivo. Il concetto di *"Metaversity"* è stato introdotto come un ambiente di apprendimento innovativo dove il sapere viene trasmesso attraverso metodologie digitali avanzate, ponendosi come obiettivo principale quello di aumentare la motivazione e il coinvolgimento attivo degli studenti.

Federico Lazzari della Scuola Normale Superiore di Pisa ha presentato *"The Virtual Laboratory Framework: Blending Computation, Representation and Visualization from Quantum Chemistry, through Machine-Learning, to Virtual Reality"*. Lazzari ha discusso le sfide della Chimica computazionale e ha proposto la costruzione di laboratori virtuali nei quali calcolo, rappresentazione e visualizzazione costituiscono un'attività integrata che amplifica le capacità di apprendimento significativo dei discendenti. Questo framework mira a semplificare l'accesso agli strumenti di Chimica computazionale per ricercatori e studenti, sfruttando le recenti innovazioni in software quantistico, cloud computing e machine learning. Ha evidenziato come le nuove tecnologie di visualizzazione stiano cambiando il modo in cui interagiamo con i dati scientifici, rendendoli più accessibili anche a chi non è esperto.

La prima parte della mattina si è conclusa con l'intervento di Pierluigi Gentili dell'Università di Perugia, che ha proposto l'inserimento di nuove tematiche nell'insegnamento della Chimica, presentando il contributo: *"Chemistry and Complexity Science*



Fig. 2 - Intervento di Carlo Fiorentini, vincitore della Medaglia Illuminati

Allied Together for a Better Future". Gentili ha sottolineato come l'umanità, in una società interconnessa a livello globale, affronti sfide che richiedono un cambiamento di paradigma nell'educazione. Ha sostenuto l'importanza che si introducano nell'offerta formativa insegnamenti interdisciplinari che includano la Scienza della Complessità, fornendo alla comunità discente strumenti per analizzare e comprendere la struttura dei sistemi complessi e le loro dinamiche. Gli studenti, imparando a riconoscere i limiti dei modelli di spiegazione che la scienza propone nella previsione dei comportamenti dei sistemi complessi, acquisiranno competenze per affrontare queste problematiche. Concludendo, Gentili ha enfatizzato il ruolo cruciale della Chimica nella salute umana, animale e ambientale, promuovendo il concetto di *"one-world chemistry"*, un approccio integrato che mette in luce la complessità del mondo chimico nei suoi aspetti sociali, economici, culturali ed etici.

La seconda parte della mattina ha riguardato una discussione centrata su metodologie didattiche innovative che consentano apprendimenti significativi da parte degli studenti.

Carlo Fiorentini, vincitore della Medaglia Illuminati, è intervenuto presentando il contributo *“Reflection on Chemistry Educational Research: the Example of the Pathway on Combustion in Elementary School”* (Fig. 2). Nel suo intervento Fiorentini ha sostenuto che la ricerca didattica in Chimica dovrebbe costruire un curriculum verticale che va dalla scuola primaria fino alla secondaria superiore, per garantire un insegnamento significativo. Questo obiettivo richiede una sinergia di competenze diverse, che spaziano dall’epistemologia alla didattica, dalla psicologia alla pedagogia. Un approccio riduzionista risulterebbe inadeguato, poiché la conoscenza deve adattarsi alle strutture cognitive e motivazionali degli studenti per essere veramente significativa. Ha inoltre sottolineato che le attività sperimentali realizzate nei laboratori didattici non garantiscono automaticamente la comprensione, poiché sono spesso “cariche di teorie” e non aiutano alla costruzione di un sapere significativo da parte dello studente. Tali attività devono essere progettate e calibrate con grande attenzione, effettuando un’analisi epistemologica e psicologica per identificare i concetti e gli esperimenti più adatti a ciascuna fascia d’età.

La mattinata si è quindi conclusa con una Tavola Rotonda coordinata da Margherita Venturi dell’Università di Bologna, che ha affrontato il tema delle metodologie didattiche e del loro rapporto con le nuove tecnologie nell’insegnamento della Chimica. Tra i temi discussi è stata dedicata particolare attenzione: alle metodologie didattiche per migliorare l’apprendimento della Chimica e superare ostacoli concettuali, specialmente alle superiori e all’università; all’importanza delle rappresentazioni grafiche delle strutture tridimensionali per facilitare la comprensione dei concetti chimici; alle tecnologie virtuali del metaverso come strumenti motivazionali per gli studenti.

I relatori hanno presentato le loro esperienze. Eleonora Aquilini, Presidente della Divisione Didattica della Chimica, ha sottolineato l’importanza dell’approccio storico-epistemologico alla comprensione della scienza, evidenziando che senza una consapevolezza critica dello sviluppo delle teorie, l’apprendimento rimane superficiale e basato su intuizioni. Vito Gallo, del Politecnico di Bari, ha proposto un approccio innovativo realizzato nel suo corso di Chimica nel quale la prova di esame è stata tra-



Fig. 3 - Intervento di Armida Torregiani, vincitrice della Medaglia Marotta

sformata in un’esperienza interattiva di *escape room*, che promuove il lavoro di squadra e l’applicazione pratica dei principi chimici. Infine, Sandro Jurinovich, dell’Istituto Tecnico “C. Cattaneo” di San Miniato (PI), ha parlato della diffusione dei “laboratori di fabbricazione” nelle scuole secondarie di secondo grado, dotati di strumenti come microcontrollori e stampanti 3D, che offrono opportunità per progetti pratici che affrontano problemi reali nel campo della Chimica. In sintesi, la sessione ha enfatizzato l’importanza di un curriculum integrato e multidisciplinare in Chimica, che unisca teoria e pratica, e l’adozione di metodi didattici innovativi per stimolare l’interesse e la comprensione degli studenti.

Comunicare e divulgare la Chimica

La prima parte della sessione pomeridiana ha visto l’intervento di Armida Torregiani del CNR-ISOF di Bologna, vincitrice della Medaglia Marotta, con il contributo *“Fostering Youngsters’ Interest in Chemistry for Sustainable Society: Mission (im)Possible!”* (Fig. 3). La dott.ssa Torregiani ha sottolineato la crescente disaffezione dei giovani verso la Chimica, legata a metodi didattici poco coinvolgenti, alla difficoltà di percepire l’impatto della scienza nella vita quotidiana e alla mancanza di prospettive professionali attrattive. Ha proposto un approccio



educativo innovativo per stimolare l'interesse degli studenti, sviluppando percorsi di apprendimento attraverso progetti come "Change the Game" e "Raw Matters Ambassadors at Schools". Questi progetti, che coinvolgono diverse scuole e istituti a livello nazionale ed europeo, utilizzano giochi ed esperimenti di laboratorio per far comprendere l'importanza della Chimica nei processi di transizione ecologica in un'ottica di sviluppo sostenibile ed economia circolare.

Massimo Polidoro, noto giornalista e divulgatore scientifico, è poi intervenuto sul tema "Communicating Science. A Creative and Ethical Challenge" (Fig. 4), nel quale ha evidenziato l'importanza di comunicare in modo chiaro ed eticamente trasparente, accendendo la curiosità del pubblico. Polidoro ha notato che molti ricercatori si rivolgono principalmente ai colleghi, chiusi in una 'bolla' autoreferenziale senza preoccuparsi di adottare strategie di comunicazione atte a coinvolgere un pubblico non specializzato. Questo approccio di 'non comunicazione' è particolarmente grave per la Chimica e contribuisce alla diffidenza che il grande pubblico nutre per questa disciplina. In maniera coinvolgente Massimo Polidoro ha, infine, fornito suggerimenti per migliorare la capacità di esprimersi in modo comprensibile e creativo.



Fig. 4 - Intervento di Massimo Polidoro

Riccardo Lucentini della Fondazione Ri.Med di Palermo con il suo intervento "Stranger Molecules: Chemistry Becomes Art" ha mostrato che la Chimica può essere vista anche come forma d'arte, attraverso la progettazione di molecole con forme sorprendenti, come l'Infinitene, il Cubano e le Nano-Cars. Ha enfatizzato la relazione tra forma e proprietà delle molecole, suggerendo che anche le creazioni più ludiche possono trovare un ruolo significativo nella comprensione scientifica, mostrando che la ricerca non è mai inutile.

Infine, Alessio Dessì del CNR-ICCOM di Sesto Fiorentino ha concluso la prima parte della sessione pomeridiana con "It's not just a Matter of Science!" In questo intervento, ha esplorato l'importanza della comunicazione efficace nella scienza, sottolineando come anche la migliore ricerca possa fallire nel catturare l'interesse se non comunicata in modo incisivo. Dessì ha presentato tecniche derivate dal mondo della recitazione per migliorare le capacità comunicative, affrontando domande fondamentali come il messaggio da trasmettere, il pubblico di riferimento e le strategie comunicative da adottare. Ha concluso sottolineando che la comunicazione scientifica è oggi essenziale, sia per il successo professionale che per l'efficacia della divulgazione.

Nella seconda e ultima parte della sessione pomeridiana, Veronica Cremonesi, Direttore della Direzione Generale Education e Formazione di Federchimica, nel suo intervento "Chemistry, a Good Choice" messo in evidenza l'importanza del legame tra la Scuola e la Chimica, sostenendo la necessità di un dialogo continuo e di collaborazioni sempre più strette. Le aziende chimiche, centrali per il settore, devono mantenere rapporti costanti con le istituzioni educative per formare giovani preparati e consapevoli delle opportunità lavorative. Negli ultimi anni, anche le piccole imprese hanno iniziato a interagire maggiormente con il territorio e, in particolare, con gli istituti di istruzione tecnica e professionale, sebbene rimanga molto da fare. Federchimica collabora da oltre 15 anni con il Progetto Nazionale di Chimica del Piano Lauree Scientifiche e con altre istituzioni per orientare e sviluppare le competenze dei giovani, mirando a tutti i livelli di istruzione, a partire dalla scuola primaria, per poi proseguire nei



Fig. 5 - Intervento di Alessia Benedetti ed Eleonora Aquilini

diversi gradi di istruzione secondaria e università. Claudio Pettinari dell'Università di Camerino e Vice Presidente della Società Chimica Italiana ha affrontato il tema della percezione negativa della Chimica nel suo intervento *"But is Chemistry Just Bad? A Journey into the Marvellous World of Cinema, from Breaking Bad to Railway Men"*, evidenziando come questa venga associata quasi sempre a fenomeni negativi, come disastri ambientali, inquinamento, danni alla salute, usi militari. Tuttavia, il ventesimo secolo ha visto un enorme sviluppo scientifico e tecnologico, con effetti positivi sulla qualità e durata della vita. Il cinema e la letteratura hanno rappresentato la Chimica in vari modi, da opere di fantascienza a film che trattano temi di inquinamento e salute. Pettinari ha sottolineato l'importanza e la necessità di una revisione della narrazione della Chimica a tutti i livelli, mettendone in luce la valenza culturale e la sua caratteristica fondante di disciplina in grado di offrire soluzioni. Infine, Alessia Benedetti, del Conservatorio di Musica "Nino Rota" di Monopoli, ed Eleonora Aquilini (Fig. 5) nel loro intervento *"Unveiling the Dual Genius of Aleksandr Porfir'evič Borodin: between Chemistry and Music"* hanno illustrato la vita e la personalità di Aleksandr Borodin, un esempio di maestria interdisciplinare che ha dato significati-

vi contribuiti sia alla Chimica sia alla musica. Borodin, noto compositore russo e chimico, ha lavorato sulla chimica delle aldeidi sviluppando le reazioni aldoliche, fondamentali per la sintesi organica, sia da un punto di vista teorico sia dal punto di vista delle applicazioni industriali. Come compositore, Borodin è famoso per le composizioni il "Principe Igor" e le "Danze Polovesiane", oltre ad altre opere sinfoniche. La presentazione si è conclusa con l'emozionante proiezione del filmato nel quale la dott.ssa Benedetti esegue un frammento delle "Danze Polovesiane". Entrambe le relatrici hanno messo in luce la profonda interazione tra scienza e arte che si realizza

in Aleksandr Borodin, una figura che ha saputo unire il rigore dell'approccio scientifico alla creatività dell'espressione artistica.

In conclusione, questa sessione, anche grazie all'attiva partecipazione del pubblico con richieste di chiarimenti e considerazioni personali, ha permesso di approfondire le tematiche affrontate, evidenziando la necessità di innovazione sia nelle strategie e nei metodi della didattica Chimica a tutti i livelli di istruzione, sia nella divulgazione della Chimica con uno sforzo mirato al superamento della visione negativa che la nostra disciplina ha in una larga parte dell'opinione pubblica.

Teaching, Learning and Communicating Chemistry

The thematic session "Education, Communication and Outreach", organized with the contribution of all the Divisions and Interdivisional Groups of the SCI, addressed the topic of teaching and learning Chemistry, discussing about innovative teaching methodologies and new technologies in schools and universities, and the topic of communicating chemistry to the general public.



Piero Ugliengo^a, Claudio Greco^b, Marco De Vivo^c

^aDipartimento di Chimica - Università di Torino

piero.ugliengo@unito.it

^bDipartimento di Scienze dell'Ambiente e della Terra - DISAT - Università degli Studi di Milano Bicocca

claudio.greco@unimib.it

^cLaboratory of Molecular Modelling and Drug Discovery, Istituto Italiano di Tecnologia

marco.devivo@iit.it

ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND MODELING FOR CHEMISTRY

Dal 26 al 30 agosto 2024 si è svolta a Milano la XXVIII edizione del Congresso Nazionale della SCI, all'interno del quale è stata organizzata la giornata tematica sull'intelligenza artificiale e modellistica per la chimica che ha coinvolto le Divisioni di Chimica Fisica, Chimica Teorica e Computazionale, Chimica Farmaceutica, Chimica per le Tecnologie, Chimica degli Alimenti, nonché il Dipartimento di Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali del Consiglio Nazionale delle Ricerche.

Nella settimana 26-30 agosto 2024 si è svolta a Milano la **XXVIII edizione del Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana** con una partecipazione molto elevata. L'organizzazione del congresso prevedeva, oltre alle giornate dedicate ai lavori specifici delle varie divisioni della SCI, una **giornata focalizzata su temi di interesse trasversale**. Un tema ha riguardato il ruolo dell'intelligenza artificiale e della modellistica molecolare nelle scienze chimiche con il coinvolgimento delle Divisioni di Chimica Fisica, Chimica Teorica e Computazionale, Chimica Farmaceutica, Chimica per le Tecnologie e Chimica degli Alimenti, nonché il Dipartimento di Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali del Consiglio Nazionale delle Ricerche, così da garantire la massima trasversalità tra diverse linee di ricerche accumulate dal ruolo sempre più importante di strumenti legati all'intelligenza artificiale (AI). La AI ha avuto, come dimostrano numerosissimi articoli sia sui quotidiani che sui social media generalisti, un enorme impatto in tutte le attività del mondo produttivo non solo industriale e nell'educazione scolastica di ogni grado. La recente apertura alla collettività di strumenti basati sui modelli di linguaggio di grandi dimensioni (LLM) come OpenAI-ChatGPT, Anthropic-Claude e Google DeepMind-Gemini stanno rivoluzionando ogni aspetto della società. Osservatori esperti predicono che il loro impatto e, specialmente, la



Fig. 1 - Frontespizio del documento della Royal Society sull'intelligenza artificiale nella scienza

velocità della loro adozione sarà decisamente superiore alle precedenti rivoluzioni industriali o della stessa rete internet. La scienza non è certo esente da questo processo. È significativo che la Royal Society abbia pubblicato un documento aperto e corposo dal titolo: **Science in the age of AI - how artificial intelligence is changing the nature and method of scientific research** (Fig. 1). Gli scienziati e i docenti a fronte di nuove rivoluzioni hanno il compito di stimolarne lo studio approfondito per capirne le profonde implicazioni e non essere schiavi di catastrofismi dettati dalla naturale tendenza di rifiutare le novità per proteggere la propria *comfort zone*.

Ovviamente anche la chimica è stata fortemente permeata dalla AI, specialmente in questo ultimo decennio. Bisogna però ricordare che l'introduzione di modelli matematici, già basati sulle reti neurali, in ambito chimico era già presente negli anni Novanta con il classico lavoro di J. Gastgeiger e J. Zupan [1]. D'altra parte, negli stessi anni, le reti neurali (NN) in chimica erano limitate dalla potenza computazionale e usavano architetture semplici come i multi-layer perceptron (MLP). L'allenamento avveniva con metodi del gradiente minimo e della *backpropagation* di base, su piccole basi di dati. Oggi, grazie alle elevatissime potenze dei Graphic Processing Units (GPU) e di framework informatici avanzati (TensorFlow, PyTorch) disponibili liberamente presso la comunità scientifica, vengono utilizzate reti profonde (DNN), convoluzionali (CNN) e basate sui grafi (GNN). I metodi di ottimizzazione

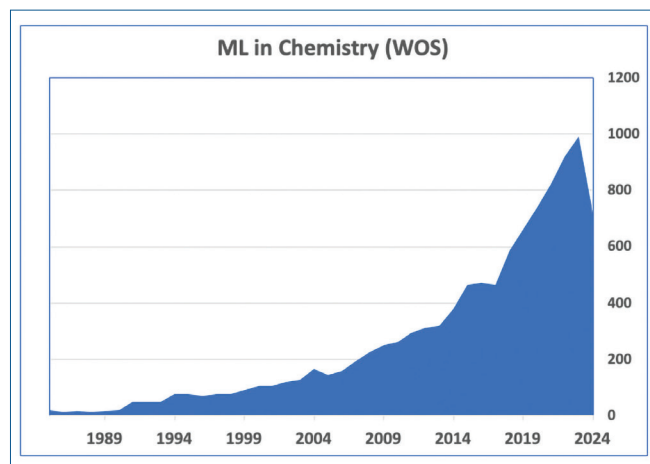


Fig. 2 - Risultato della ricerca per Topic sul Web of Science della stringa "ML in Chemistry" alla data del 19/08/2024

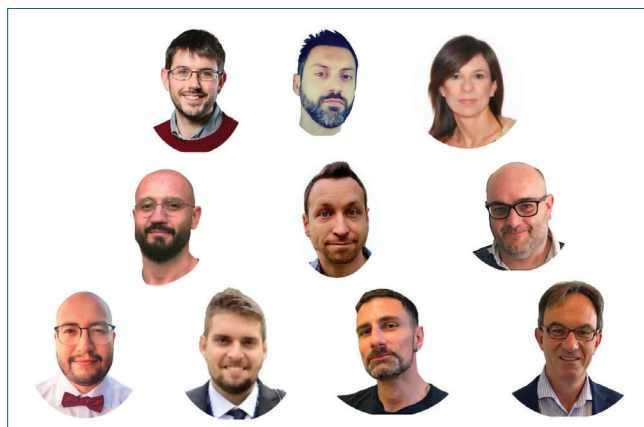


Fig. 3 - I keynote speaker: (in alto) Michele Ceriotti, Alfonso Pedone, Maria Cristina De Rosa; (al centro) Giovanni Maria Piccini, Massimo Delle Piane, Piero Macchi; (in basso) Manuel Jose Ruiz Munevar, Eugenio Alladio, Luca Dellafiara e Andrea Cavalli

sono più sofisticati (Adam, dropout) e l'accesso a grandi database chimici (PubChem, ChEMBL) permette di applicare le NN alla scoperta di farmaci, materiali, e simulazioni chimiche con precisione sempre più elevata. Se interroghiamo ChatGPT relativamente al ruolo del machine learning (ML) in chimica otteniamo: "Il machine learning (ML) nelle scienze chimiche è l'applicazione di algoritmi di apprendimento automatico per analizzare, modellare e prevedere comportamenti chimici complessi. Viene utilizzato per accelerare la scoperta di nuovi materiali, ottimizzare reazioni chimiche, prevedere proprietà molecolari e analizzare grandi quantità di dati sperimentali e computazionali. Il ML permette di identificare pattern e correlazioni che possono non essere evidenti tramite metodi tradizionali, riducendo il tempo e i costi della ricerca chimica e migliorando l'efficienza dei processi". La rapidissima crescita di queste metodiche è evidente dalla ricerca del topic "ML in Chemistry" sul Web of Science come illustrato nella Fig. 2.

La giornata tematica è stata organizzata in ben nove *keynotes* su invito di 30' a cui hanno contribuito colleghi italiani dall'elevato profilo scientifico internazionale e otto contributi orali di 15' selezionati tra giovani ricercatori emergenti nel campo del ML e della modellista teorica in chimica (Fig. 3). Nel seguito verranno sintetizzati i soli interventi delle *keynote* per ragioni di spazio. L'apertura della **sessione mattutina** (Chair: Piero Ugliengo) è stata affidata a Michele Ceriotti, che dirige il labora-



torio di Scienza e Modellazione Computazionale, presso l'Istituto dei Materiali dell'EPFL, relativo allo sviluppo di metodi per la modellazione atomistica dei materiali basati sulla meccanica statistica e sull'apprendimento automatico. Ceriotti è internazionalmente noto per i suoi studi fondamentali del ML in chimica. Nel suo contributo "*Bottom-up machine learning for chemical modeling*" sono stati illustrati i più moderni metodi di apprendimento da dati quanto-meccanici rigorosi. Le applicazioni ora possibili con questi strumenti permettono un'estensione importante degli intervalli di temperatura, pressione e tempo di molti sistemi di grande interesse applicativo [2]. Alfonso Pedone, professore associato del Dip. di Scienze Chimiche e Geologiche dell'Università di Modena e Reggio-Emilia nel contributo "*Enhancing atomistic simulations of oxide glasses through the power of machine learning*" ha mostrato l'uso del ML in materiali vetrosi ossidici a composizione chimica variabile, che ora consentono lo studio rigoroso delle proprietà spettroscopiche (NMR) di questi importanti materiali [3]. Maria Cristina De Rosa dirigente di ricerca della sezione di Roma, presso l'Università Cattolica, dell'Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche "Giulio Natta" (SCITEC) del CNR nel contributo "*From molecular modeling to data science: shaping computer-aided drug design for new therapeutic strategies*" ha mostrato il ruolo del ML nella modellazione molecolare e progettazione di farmaci [4]. La **seconda sessione mattutina** (Chair: Bartolomeo Civalleri) ha visto il contributo di Giovanni Maria Piccini "*Unravelling the molecular aspects of catalysts under operating conditions combining simulations and machine learning*"; il prof. Piccini, già all'Università di Groningen e ora professore associato del Dip. di Scienze Chimiche e Geologiche dell'Università di Modena e Reggio-Emilia, nel suo contributo ha mostrato come l'apprendimento automatico da dati *ab initio* di dinamica molecolare possa consentire l'esplorazione molto più accurata della superficie di potenziale così cruciale nei processi di catalisi eterogenea che avvengono nelle zeoliti [5]. Massimo Delle Piane, ricercatore presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Applicate del Politecnico di Torino nel contributo "*The hidden dynamics of metals: a deep dive fueled by ML*" ha mostrato come il ML grazie ad evoluzioni temporali molto lunghe riveli

una natura dinamica delle superfici e dei clusters metallici ad alta temperatura destinato a cambiare il paradigma di staticità attribuita ai sistemi metallici nelle applicazioni della modellistica tradizionale [6]. Piero Macchi, professore ordinario presso il Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica del Politecnico di Milano con una lunga esperienza di cristallografo, nel contributo "*Quantum crystallography and quantum computing*" ha illustrato i concetti fondamentali della cristallografia quantistica che combina informazioni sperimentali provenienti da misure di diffrazione a raggi X sui cristalli e la teoria quantistica mostrandone le potenziali applicazioni nel quantum computing [7]. Nella **prima parte della sessione pomeridiana** (Chair: Marco De Vivo) Manuel Jose Ruiz Munevar, ricercatore presso il Molecular Modeling & Drug Discovery Laboratory dell'Istituto Italiano di Tecnologia, nel contributo "*Deep learning to design novel and selective nkcc1 inhibitor chemotypes for the treatment of brain disorders with defective nkcc1/kcc2 ratio*" ha illustrato come diversi studi mostrino un'alterata omeostasi del cloruro nei disturbi cerebrali. L'inibizione della proteina di membrana NKCC1 migliora i sintomi, portando alla scoperta dell'inibitore IAMA-6 e di nuovi composti con specifiche proprietà sviluppati utilizzando metodi computazionali e di ML [8].

Eugenio Alladio, professore associato del Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino, nel contributo "*Chemometrics in clinical chemistry: examples of open-source applications for method validation and evaluation of real cases*" ha mostrato come in chimica clinica, la fusione della chemiometria con il software open-source SpectrApp (di cui è autore) sia fondamentale per garantire risultati analitici solidi e replicabili, in particolare nella validazione dei metodi e nelle valutazioni di casi reali [9]. Luca Dellafiora, ricercatore presso il Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco dell'Università di Parma nel contributo "*Food toxicology and food bioactives assessment through in silico methods - is AI the new era of testing?*" ha mostrato come AI e il ML possono migliorare la sicurezza alimentare consentendo analisi multidimensionali su larga scala, affinando la valutazione del rischio chimico e facilitando il processo decisionale attraverso algoritmi avanzati [10]. La parte

Commento sui premi Nobel 2024

A poco più di un mese dal termine del congresso della SCI, l'Accademia delle Scienze Svedese ha assegnato entrambe i premi Nobel per la Fisica e la Chimica a temi strettamente connessi a quelli della giornata tematica: "Artificial intelligence and modeling for chemistry" i cui dettagli sono stati descritti in questo articolo. Il premio Nobel per la Fisica è stato assegnato a John J. Hopfield dell'Università di Princeton e a Geoffrey E. Hinton dell'Università di Toronto "Per le scoperte e invenzioni fondamentali che permettono l'apprendimento automatico con reti neurali artificiali". I vincitori hanno utilizzato strumenti della fisica per costruire metodi che hanno contribuito a porre le basi per l'apprendimento automatico odierno (ML: Machine Learning). John Hopfield ha creato una struttura capace di memorizzare e ricostruire informazioni, mentre Geoffrey Hinton ha inventato un metodo che scopre autonomamente le proprietà nei dati, diventato cruciale per le grandi reti neurali artificiali in uso. Il premio Nobel per la Chimica (v. commento a pag. 10 di questo numero) è stato assegnato a David Baker dell'Università di Washington "per la progettazione computazionale delle proteine" e Demis Hassabis e John M. Jumper di Google DeepMind "per la previsione della struttura proteica" utilizzando l'intelligenza artificiale. David Baker è riuscito nell'impresa quasi impossibile di costruire tipi di proteine completamente nuovi specificandone prima la struttura tridimensionale desiderata per poi predire, *in silico*, quali amminoacidi sarebbero stati necessari per la realizzazione della struttura desiderata, grazie alle informazioni sperimentali contenute nel *protein data bank*. Demis Hassabis e John Jumper hanno sviluppato un modello di intelligenza artificiale per risolvere un problema vecchio di 50 anni: prevedere il folding delle proteine, cruciale per l'espressione del loro funzionamento. Così mentre con il software ROSETTA, messo a punto da David Baker, è possibile predire la sequenza primaria estratta dalla ipotetica struttura proteica e farla poi codificare da un batterio geneticamente modificato, Demis Hassabis e John M. Jumper con la creazione modello AI AlphaFold2 sono riusciti a prevedere la struttura di quasi tutte le 200 milioni di proteine identificate dai ricercatori, partendo esclusivamente dalla loro sequenza primaria. Dalla loro scoperta, AlphaFold2 è stato utilizzato da oltre due milioni di persone di 190 Paesi. Nella giornata tematica si possono identificare specifici contributi basati sul ML in vari settori della chimica. Si parte dall'illustrare le sofisticate implementazioni delle più moderne reti neurali profonde in ambito chimico (M. Ceriotti), alla predizione di spettri NMR in materiali vetrosi (A. Pedone), alla catalisi eterogena (G.M. Piccini) fino ad applicazioni in campo del drug-design (M.C. De Rosa) e dell'inibizione di canali di membrana (M.J. Ruiz Munevar). È perciò facile immaginare che la comunità chimica tutta sarà stimolata a esplorare l'utilizzo di strumenti di AI nell'immediato futuro che, ben lontani dal rimpiazzare la creatività umana, al contrario ne potenzieranno l'effetto grazie a scoperte più rapide in campi cruciali per la nostra sopravvivenza, dai materiali per l'energia allo sviluppo di rivoluzionari farmaci.



Fig. 4 - La Prof.ssa Maria Cristina Menziani, nel momento della consegna della Medaglia Cesare Pisani della Società Chimica Italiana da parte del Presidente Prof. Gianluca Farinola

conclusiva pomeridiana (Chair: Claudio Greco) ha visto la sessione dedicata alla *Medaglia Cesare Pisani*, conferita dalla Società Chimica Italiana alla Prof.ssa Maria Cristina Menziani, per “l’eccellente attività scientifica volta alla razionalizzazione ed interpretazione di dati sperimentali riguardanti sistemi di interesse biologico e farmacologico, basate sullo sviluppo di innovative strategie di modellistica molecolare funzionali alla progettazione di nuovi farmaci e biomateriali, contribuendo significativamente al progresso della ricerca in campo terapeutico”. La Prof.ssa Menziani, nel suo contributo: “1988-2024, a 35-years journey across computational life and material sciences” ha illustrato il suo trentennale percorso di ricerca mettendo in luce come la chimica computazionale e la modellistica possano contribuire tramite gli stessi strumenti a chiarire sia le delicate interazioni tra un farmaco e il suo recettore che le caratteristiche superficiali di complessi materiali a base inorganica utilizzabili come biomateriali, unendo quindi la *soft-matter* con la *hard-matter* [11] (Fig. 4).

Andrea Cavalli, professore ordinario presso il Dipartimento di Farmacia e Biotecnologie dell’Università di Bologna e associato all’IIT e attuale direttore del CEAM nel contributo “*Role of computational methods in the era of precision medicine*” ha mostrato come AI e ML possano accelerare la dinamica molecolare nella scoperta dei farmaci, consentendo un’esplorazione efficiente degli spazi conformazionali delle molecole, migliorando i cal-

coli dell’energia libera e della cinetica e affrontando le sfide dello sviluppo di nuovi farmaci [12]. In conclusione, la sessione sull’intelligenza artificiale e modellistica per la chimica ha registrato un’ampia partecipazione di colleghi con interessanti contributi da parte di giovani ricercatrici e ricercatori. Anche la fase di discussione a valle di ogni contributo è stata rilevante.

BIBLIOGRAFIA

- [1] J. Gasteiger, J. Zupan, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1993, **32**, 503.
- [2] S. Back, A. Aspuru-Guzik *et al.*, *Digital Discovery*, 2024, **3**, 23.
- [3] M. Bertani, T. Charpentier *et al.*, *J. Chem. Theory Comput.*, 2024, **20**, 1358.
- [4] C. Camponeschi, B. Righino *et al.*, *Biomolecules*, 2023, **13**, 1047.
- [5] G.M. Piccini, M.S. Lee *et al.*, *Catal. Sci. Technol.*, 2022, **12**, 12.
- [6] M. Cioni, M. Delle Piane *et al.*, *Adv. Science*, 2024, **11**, 2307261.
- [7] P. Macchi, *Cryst. Rev.*, 2020, **26**, 209.
- [8] M.J. Ruiz Munevar, V. Rizzi *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2024, **146**, 552.
- [9] E. Alladio, F. Trapani *et al.*, *J. Pharm. and Biom. Anal.* 2024, **244**, 116113.
- [10] L. Dellafiora, G. Aichinger *et al.*, *Food chemistry*, 2019, **270**, 61.
- [11] D. Carrozza, G. Malavasi *et al.*, *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, **24**, 880.
- [12] S. Majumdar, F. Di Palma *et al.*, *J. Chem. Inform. Model.*, 2023, **63**, 4814.

XXVIII National Congress of the Italian Chemical Society

From Aug. 26-30, 2024, the XXVIII National Congress of the Italian Chemical Society (SCI) was held in Milan, Italy, within which the thematic day on artificial intelligence and modeling for chemistry was organized involving the SCI divisions of Physical Chemistry, Theoretical and Computational Chemistry, Pharmaceutical Chemistry, Chemistry for Technologies, Food Chemistry, and the National Research Council - CNR.



Marta Da Pian^a, Alessandro Minguzzi^b

^aElsevier B.V, Amsterdam (NL) e coordinatrice del Gruppo Giovani

^bDipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano e Presidente della Sezione Lombardia

INCLUSION, EQUITY, DIVERSITY AND ETHICS

La scienza non riguarda solo ciò che gli scienziati fanno, ma anche come lo fanno. Temi come inclusione, equità, diversità ed etica devono essere integrati in ogni fase del lavoro scientifico, dalla composizione dei gruppi di ricerca alla progettazione degli esperimenti, fino alla disseminazione dei risultati. Questo approccio non è solo un atto di civiltà, ma un miglioramento della qualità della ricerca e delle attività professionali. Durante questa sessione del congresso, esperti provenienti da vari ambiti hanno analizzato lo stato attuale di questi temi, evidenziando progressi, ma anche aspetti ancora da migliorare. La consapevolezza del problema, manifestata per la prima volta in un congresso della Società, è vista come un segno positivo per il futuro.

Il primo chimico del mondo riconosciuto dalla storia è stato... UNA chimica: Tappūti-bēlat-ekalle, un'esperta profumiera assira, intorno al 1200 a.C. [1]. 2900 anni dopo (1758), Pierre Boudier de Villemert suggeriva alle donne di “perseguire campi dove hanno un vantaggio e potrebbero persino superare gli uomini: campi che richiedono l'uso della fantasia”, come la chimica. Ce lo ha ricordato Vanessa Seifert (Marie Skłodowska Curie Postdoctoral Fellow University of Athens/University of Bristol, Fig. 1A) nella presentazione d'apertura della sessione 11: Inclusion, Equity, Diversity and Ethics, organizzata dal Gruppo Giovani e dalla Sezione Lombardia, insieme alle delegate e ai delegati di tutte le Divisioni e del gruppo Senior, e arricchita da due brevi interventi di saluto da parte del Presidente Gianluca Farinola e della past president SCI e presidente EUCHEMS Angela Agostiano.

Seifert ha insistito sul ruolo che la donna ha sempre avuto, pur dietro le quinte, nella chimica, a cominciare dalla considerazione che la cucina era considerata una parte fondamentale della medicina, e che cuoche/i e chimiche/ci sperimentali erano figure spesso indistinguibili, basti pensare al lavoro di Accum Friedrich.

Maria Edgeworth, una famosa scrittrice inglese vissuta nella prima metà dell'Ottocento sosteneva che la chimica offrisse diverse attività da svolgere e non fosse troppo onerosa (non richiedesse forza fisica),

potesse essere svolta in isolamento, avesse conseguenze pratiche e potesse essere utile in casa. Non c'è da stupirsi, quindi, nello scoprire che il primo manuale di chimica è stato scritto da una donna: *La chime charitable et facile, en faveur des dames*, Marie Meurdrac, 1666 [2], Fig. 1B.

Il libro è consultabile a questo link [La chymie charitable et facile en faveur des dames \(2e éd.\) / par damoiselle M. M. | Gallica](#)

Ciononostante, solo da pochi anni la presenza delle donne in ricerca e sviluppo della chimica o di altre materie scientifiche non è più vista come un'anomalia in un contesto che in passato era fortemente sessista.



Fig. 1 - A) Dr. Vanessa Seifert, B) il frontespizio del libro *La chime charitable et facile, en faveur des dames* di Marie Meurdrac



Fig. 2 - A) Michiel Kolman, B) Mariasole Bannò

Oggi sappiamo che le donne hanno una tolleranza alle tossine inferiore rispetto agli uomini, ma la maggior parte delle ricerche viene condotta sull'“uomo di riferimento”: caucasico, 25-30 anni, del peso di 70 kg. Permane quindi una disparità evidente negli studi scientifici in quanto non ancora declinati nel genere. Viene spontaneo chiedersi, ad esempio, perché la contraccettione farmacologica debba essere un tema di pertinenza quasi esclusivamente femminile. Seifert ha concluso chiedendosi (e chiedendoci) in che modo dovremmo perseguire la parità di genere. Con un approccio “gender neutral”, ovvero eliminando qualsiasi riferimento al genere? Oppure con un approccio attivo, permettendo ai gruppi sottorappresentati, in forme organizzate, di svilupparsi e di avere un posto nella pratica scientifica?

La risposta a questa domanda (seppur retorica) è arrivata nelle relazioni successive, evidenziando che le organizzazioni inclusive hanno le prestazioni migliori: i gruppi di lavoro “misti” per genere, età, sessualità, provenienza geografica ed etnia, disabilità, situazione socioeconomica, istruzione, religione, sono i più efficienti ed efficaci [3]. Se n'è accorta da tempo l'Unione Europea, che già nel 1957 (quando ancora era CEE), citava la *gender equality* nel suo trattato istitutivo.

Di questo abbiamo parlato con Michiel Kolman, Vice President of Research Networks e Academic Ambassador di Elsevier e con Mariasole Bannò, che presiede la Commissione Genere dell'Università degli Studi di Brescia (Fig. 2).

Lo abbiamo fatto non solo per rimarcare il diritto, inalienabile e inconfutabile, che tutti gli esseri umani devono poter partecipare a qualsiasi attività senza sentirsi discriminati, ricevendo pari trattamento

e senza alcuna barriera, ma anche per informare e sensibilizzare sul fatto che la scienza non può che trarre vantaggio da gruppi di lavoro inclusivi e da ricerche che valorizzino le diversità.

Kolman ha sottolineato questi concetti, estendendo il concetto di *Diversity Equity and Inclusion* (DEI) oltre al genere. Il *gender balance* sta infatti progressivamente arrivando a stabilità, considerando che nell'ambito della ricerca scientifica mondiale, il 41% delle persone attive sono donne. Il valore sale considerando l'EU (42%), mentre l'Italia raggiunge il 46%. Nella sessione d'apertura del Congresso SCI 2024, il Presidente Farinola sottolineava che il 51% degli iscritti alla SCI sono donne. Dati che portano ottimismo, ma che non devono essere presi da soli. Sono, infatti, solo il 21% le domande di brevetto che vedono almeno una donna come autrice o co-autrice (contro il 98% degli uomini).

C'è ancora molto da fare anche sul fronte dell'inclusione di provenienza geografica e di orientamento sessuale. Il cambiamento è possibile, anche partendo dall'ambito delle grandi aziende di publishing, dove è necessario un approccio strutturato con un chiaro supporto esecutivo. Esempi di atti concreti sono l'organizzazione delle *LGBTQIA+ Workplace Inclusion conferences* e costituire dei modelli di business case con obiettivi di DEI.

Mariasole Bannò ('indegnamente' sostituita da Alessandro Minguzzi, che ne ha riportato le parole, essendo la prima impossibilitata alla presenza), ha rimarcato questi concetti, ricordando che la scienza è solo apparentemente oggettiva. Di chi è la curiosità che guida la ricerca? Chi decide cosa vale la pena studiare? La scienza è ciò che fanno gli scienziati, che intraprendono molte azioni che hanno a che fare col genere, come usare metafore e luoghi comuni, scegliere esempi, dare un nome alle cose (macchine, laboratori, particelle, equazioni), rappresentare la scienza con etichette e immagini, utilizzare modelli di ruolo, scegliere i metodi e cosa ricercare, definire i team e le collaborazioni.

La presentazione di Bannò si è poi focalizzata sui concetti, fondamentali, di:

- ricerca *gender-sensitive*, quando il genere è costantemente preso in considerazione durante l'intera ricerca;
- ricerca *gender-blind*, che non tiene conto del genere, essendo basata sul presupposto, spes-

so errato, che le possibili differenze tra uomini e donne non siano rilevanti per la ricerca in questione;

- pregiudizio di genere nella ricerca è la differenziazione, spesso non intenzionale e implicita, tra uomini e donne, ponendo un genere in una posizione gerarchica rispetto all'altro in un determinato contesto, come risultato di immagini stereotipate di mascolinità e femminilità.

La risposta del mondo della ricerca si deve articolare su diversi fronti, affinché la partecipazione delle donne alla scienza e alla ricerca sia incoraggiata, per approfondire la stessa ricerca sulla questione di genere, e perché la ricerca affronti in egual misura le esigenze di donne e uomini.

Il primo punto, come già accennato, si rafforza nel fatto che una squadra inclusiva sia una squadra migliore, anche solo considerando che le eccellenze vadano ricercate nell'intera popolazione e non in parte di essa.

Questo però non basta.

La ricerca *gender-sensitive* permette di ottenere risultati migliori: se consideriamo le differenze di genere quando progettiamo gli studi, evitiamo conclusioni distorte e ci assicuriamo che i nostri risultati siano veramente rappresentativi di tutte le popolazioni. Categorie come "pazienti" o "utenti" sono troppo ampie se non distinguono tra uomini e donne.

La questione del genere (e, più estesamente, i principi della DEI) va considerata in tutte le fasi della ricerca, dall'idea iniziale e dalle ipotesi alle metodologie, dalla gestione dei dati ai report intermedi e finali. Il quinto contributo alla sessione è stato focalizzato sull'etica nella ricerca in chimica, tematica sulla quale il mondo dei chimici è particolarmente sensibile. Basti pensare, infatti, alla drammatica sequenza di tragedie umane e ambientali causate troppo spesso dalla cattiva gestione di impianti e/o processi chimici o dal cattivo stoccaggio di reagenti e/o reflui. Esempio ne sono il disastro di Minamata (1950), o la più recente (2020) esplosione a Beirut, dovuta alla detonazione di più di 2000 t di NH_4NO_3 . Anche per colpa di questi eventi storici nacque l'assunzione irrazionale che

tutte le sostanze chimiche siano dannose e nocive, ovvero la chemofobia, come ci ha ricordato Maddalena Busetto, Agenzia Regionale per la Protezione Ambientale - ARPA Lombardia e referente Commissione Pari Opportunità Ordine Interprovinciale dei Chimici e dei Fisici della Lombardia (Fig. 3). Busetto ha ricordato come anche in risposta a questo, le autorità nazionali e internazionali stiano compiendo uno sforzo enorme nella regolamentazione della produzione e dell'uso delle sostanze chimiche. Ne sono un valido esempio la Convenzione sulle Armi Chimiche (1997), il Protocollo di Montreal sulle sostanze che riducono lo strato di ozono (1989), la Convenzione di Stoccolma sugli inquinanti organici persistenti (2004), la Convenzione di Rotterdam sulla procedura di consenso informato a priori per alcuni prodotti chimici e pesticidi pericolosi nel commercio internazionale (2004) e il Protocollo di Kyoto (2005) per limitare l'emissione dei gas-serra.

Inclusione, diversità, equità, etica sono concetti interconnessi, intrecciati, che devono trovare spazio nella formazione dei giovani, permettendo loro di crescere in un ambiente maturo, non solo nella società ma anche in ambito professionale. La scuola ha in questo un ruolo insostituibile, che deve però utilizzare metodologie di insegnamento originali e accattivanti.

Il teatro, ad esempio.

Ce ne hanno fornito una prova Teresa Cecchi e Arianna Giuliani, docenti all'ITT G. e M. Montani di Fermo, insieme alle bravissime (in chimica e in inglese!) studentesse Chiara Spreca e Giorgia Tarro Boiro, con un assaggio dello spettacolo "Gli zuccheri di Carolyn", in scena questo autunno a Torino e a Fermo (Fig. 4).



Fig. 3 - A) Maddalena Busetto, B) un'immagine del ground zero a seguito dell'esplosione del 2020 a Beirut, licenza CC BY 4.0



Fig. 4 - A) Teresa Cecchi, B) le studentesse Chiara Spreca e Giorgia Tarro Boiro, nel corso della presentazione al Congresso

Il titolo è un evidente e non casuale riferimento al lavoro di Carolyn Bertozzi, vincitrice del premio Nobel per la Chimica nel 2022. La prima donna dichiaratamente omosessuale ad aver vinto un premio Nobel. Uno spettacolo “col botto”, come la reazione particolarmente vivace subita da un orsetto gommoso immerso in una soluzione di clorati che le studentesse ci hanno mostrato (in video!).

Perché proprio il teatro?

Perché le esperienze spettacolari sul palco sono emozionanti e stimolanti ed hanno una forte valenza didattica con un approccio formale/informale, ma che devono raggiungere un elevato “controllo” (e quindi conoscenza) degli esperimenti. Il teatro permette anche di generare un legame tra discipline umanistiche e scientifiche, oltre a permettere la diffusione della cultura chimica ad adulti (probabilmente) che soffrono di chemofobia.

In conclusione, la sessione è stata una buona “prima volta” in un congresso SCI, ed è stata possibile grazie al lavoro delle delegate e dei delegati delle Divisioni e del Gruppo Senior: Raffaella Biesuz (Chimica Analitica), Luca Rivoira (Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali), Marialuisa Saladino (Chimica Fisica), Alessandra Crispini (Chimica Inorganica), Marta Feroci (Chimica per le Tecnologie), Paola Ambrogi, Teresa Cecchi (Didattica Chimica), Emanuela Gregori (Spettrometria di Massa), Francesca Cantini (Chimica dei Sistemi Biologici), Maria Laura Bolognesi (Chimica Farmaceutica), Federica Menegazzo (Chimica Industriale), Francesca D’Anna (Chimica Organica), Greta Donati (Chimica Teorica e Computazionale), Giuseppina Meligrana (Elettrochimica), Paolo Ca-

liceti (Tecnologia Farmaceutica), Gianni Galaverna (Chimica degli Alimenti), Franco Alhaique (Gruppo Senior), Claudia Bonfio (Gruppo Giovani), Emanuela Licandro, Laura Borgese, Paola Fermo, Matteo Guidotti (Sezione Lombardia)

BIBLIOGRAFIA

- [1] H. Wills, S. Harrison *et al.*, *Women in the history of science: A sourcebook*, UCL Press, 2023, pag. 476.
- [2] L. Schiebinger. *The mind has no sex?: Women in the origins of modern science*. Harvard University Press, 1991.
- [3] Y. Yang, T.Y. Tian *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2022, **119**, e2200841119

Inclusion, Equity, Diversity and Ethics

Science is not only about what scientists do, but also how they do it. Issues such as inclusion, equity, diversity and ethics must be integrated into every phase of scientific work, from the composition of research groups to the design of experiments, to the dissemination of results. This approach is not only an act of civility, but an improvement in the quality of research and professional activities. During this session of the congress, experts from various fields analysed the current state of these issues, highlighting progress, but also aspects that still need improvement. The awareness of the problem, expressed for the first time at a congress of the Society, is seen as a positive sign for the future.



SMART MATERIALS

La sessione Smart Materials del Congresso SCI 2024 si è rivelata un'ottima occasione di confronto tra ricerca e industria, offrendo un'ampia panoramica sulla relazione esistente tra struttura e potenziale applicativo di materiali soft e hard.

L'organizzazione della sessione *Smart Materials* del Congresso SCI 2024 è stata coordinata dai delegati della Divisione di Chimica Organica e di Elettrochimica, con il supporto delle Divisioni di Chimica Inorganica, Chimica Fisica, dei Gruppi Interdivisionali delle Energie Rinnovabili, di Fotochimica, delle Biotecnologie nonché del CNR. La costituzione ampia e variegata del gruppo di lavoro rispecchia perfettamente la natura interdisciplinare della tematica, i cui prodotti di ricerca trovano

massima espressione tanto nella ricerca di base che in quella applicata.

Obiettivo fondamentale e filo conduttore della sessione parallela, è stata la panoramica sulla relazione esistente tra struttura e applicazione di materiali *hard* e *soft*. I contributi hanno dimostrato la poliedricità di tali materiali, la cui applicazione spazia dal settore ambientale, a quello alimentare, passando attraverso la salvaguardia della salute umana (Fig. 1). Tutto ciò si realizza attraverso approcci multidisciplinari che coinvolgono chimici e fisici, unitamente a biologi e ingegneri.

La sessione è stata caratterizzata dagli interventi di quattro insigni ricercatori, che hanno ricevuto importanti riconoscimenti da parte della Società Chimica Italiana e delle sue Divisioni. A tal proposito, è d'obbligo menzionare la Medaglia Paternò, conferita a Luca Prodi (Università di Bologna), la Medaglia Piria, conferita a Maurizio Prato (Università di Trieste), la Medaglia Sacconi, conferita a Anne-Marie Caminade (CNRS di Parigi) e il Premio alla Ricerca "Chimica Organica per l'ambiente, l'energia e le nanoscienze", conferito a Manuela Melucci

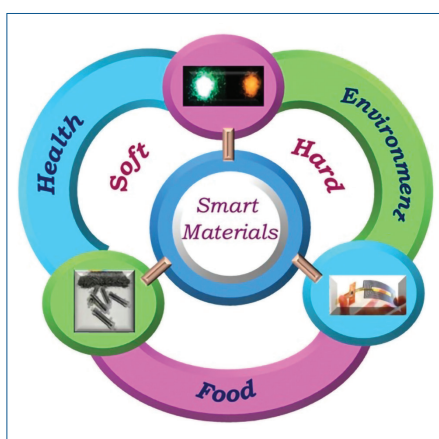


Fig. 1 - Rappresentazione schematica delle tematiche della Sessione

(CNR di Bologna). Le motivazioni a supporto del conferimento dei riconoscimenti, così come gli argomenti affrontati negli interventi, hanno chiaramente evidenziato il potenziale applicativo degli *smart materials*.

Luca Prodi ha aperto la sessione con un intervento sulle tecniche di rilevamento di analiti di rilevanza clinica e ambientale basate sulla luminescenza. Ha evidenziato il ruolo chiave della luce nell'ambito di diverse applicazioni, tra cui la generazione di agenti

di contrasto per l'imaging *in vivo*, il raggiungimento di elevate prestazioni analitiche nella diagnostica *in vitro* e la misurazione, risolta nel tempo e nello spazio, di analiti di rilevanza biologica e ambientale. Le tecniche basate sulla luminescenza offrono elevata sensibilità e versatilità e hanno condotto allo sviluppo di una piattaforma accurata, rapida, economica e portatile per il rilevamento di agenti infettivi, utilizzando l'elettrochemiluminescenza come meccanismo di trasduzione del segnale



Luca Prodi



Maurizio Prato



[1], e alla progettazione di polimeri naturali derivatizzati per rilevare micro e nano-plastiche [2]. Maurizio Prato ha focalizzato il suo intervento sugli studi relativi allo sviluppo di sistemi innovativi, a base di nanotubi di carbonio, per la potenziale terapia di lesioni spinali o malattie neurodegenerative. Attraverso funzionalizzazioni chimiche mirate ed elevata ingegnerizzazione delle metodiche di preparazione dei materiali sono stati sviluppati dei sistemi in grado di stabilire un eccellente livello di interazione con le cellule neuronali, favorendo lo scambio di impulsi elettrici tra compartimenti diversi del neurone, migliorandone o ripristinandone la sua funzione interattiva. Nella parte finale della sua relazione Prato ha illustrato le sue ricerche nel campo dei *carbon nanodots*, nanoparticelle luminescenti, le cui proprietà e applicazioni possono essere finemente modulate attraverso opportune strategie di sintesi e postfunzionalizzazione.

Maria Rosaria Plutino (ISMNS-CNR di Messina) ha presentato una panoramica sui materiali ibridi multifunzionali intelligenti basati su una matrice polimerica multicomponente [3]. Nell'intervento sono stati messi in luce i vantaggi forniti da questi materiali, che combinano componenti organici e inorganici a livello nanometrico o molecolare, in termini, per esempio, di resistenza, conducibilità, flessibilità. La loro adattabilità ed il carattere innovativo hanno attirato molta attenzione nella prospettiva di potenziali applicazioni in vari settori industriali. Plutino ha inoltre evidenziato la relazione tra le funzionalità e le proprietà dei sistemi ottenuti, valutando vantaggi e sfide di un approccio razionale "safe and sustainable by design" per aprire la strada a prodotti e tecnologie più ecologici e innovativi.

Benedetta Carlotti (Università di Perugia) ha presentato uno studio approfondito sulle dinamiche dello stato eccitato di diversi cromofori donatore-accettore, che mostrano emissione indotta dall'aggregazione (AIE). La ricerca ha impiegato spettroscopie risolte nel tempo, consentendo una comprensione meccanicistica completa delle relazioni struttura-proprietà che influenzano l'AIE. I risultati sperimentali hanno permesso di delineare conclusioni generali su cui sviluppare nuovi *AIEgen* puramente organici. È emerso come un aumento del carattere di trasferimento di carica intramolecolare porti all'attivazione della fosforescenza a temperatura ambiente e della fluorescenza ritardata attivata ter-

micamente, la cui efficienza risulta ulteriormente migliorata dall'aggregazione.

Jurriaan Huskens (Università di Twente) ha discusso delle interazioni multivalenti nel rilevamento di DNA e virus [4]. Ha spiegato come la multivalenza descriva molte interazioni in natura, ad esempio l'interazione tra virus e membrane cellulari. Huskens ha mostrato l'uso di gradienti superficiali di doppi strati lipidici supportati, modificati con recettori, per visualizzare e quantificare la dipendenza dalla densità dei recettori in un'unica immagine microscopica. Questa tecnica, chiamata "Multivalent Affinity Profiling" [5], permette di quantificare la densità di soglia, confrontare le selettività di legame per diversi ceppi virali e offre quindi una comprensione molecolare del paesaggio energetico di legame supramolecolare. Ha anche descritto come gli stessi principi di legame multivalente debole e superselettivo possano essere utilizzati nella progettazione di un dispositivo che cattura selettivamente il DNA ipermetilato, un biomarcatore del cancro [6].

Giuseppina Sandri (Università di Pavia) ha presentato i risultati sui nanocompositi intelligenti nell'ingegneria tissutale dei tendini. Ha descritto lo sviluppo di scaffold fibrosi e scaffold 3D altamente porosi, utilizzando polimeri termoplastici come poliuretano e polidrossibutirrato, associati a polimeri naturali biomimetici come gelatina o condroitina solfato. Il drogaggio inorganico con ossidi di cerio, rame e ferro conferisce agli scaffold proprietà superiori di riparazione tissutale e antimicrobiche. Sandri ha illustrato l'approccio multidisciplinare che include una caratterizzazione fisico-chimica e una caratterizzazione preclinica, aprendo la strada a una traslazione verso la clinica.

Gloria Guidetti (Tetra Pak Packaging Solutions) ha discusso i requisiti dei materiali avanzati per la progettazione sostenibile di attrezzature per il confezionamento alimentare. Ha evidenziato come le industrie del packaging alimentare stiano cercando soluzioni sostenibili non solo per lo sviluppo della struttura dei materiali di imballaggio, ma anche per l'ottimizzazione della progettazione dei componenti delle attrezzature. Ha descritto le attività di ricerca mirate all'ottenimento di polimeri sostenibili per componenti industriali, la tribologia verde, i materiali autolubrificanti, la funzionalizzazione delle superfici e i materiali avanzati e a base di carbonio.

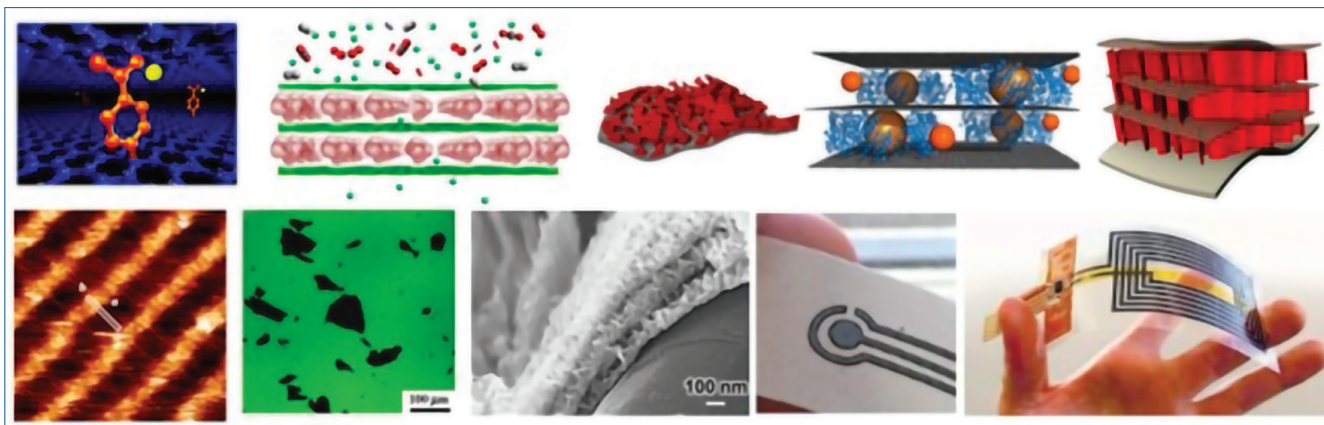


Fig. 2 - Illustrazione degli approcci di modifica, intercalazione, caratterizzazione ed applicazione del grafene [7]

Vincenzo Palermo (ISOF-CNR di Bologna) ha ripercorso la storia del grafene, da curiosità di laboratorio a svolta nell'innovazione industriale. Ha spiegato come il grafene sia passato dall'essere principalmente un gioco per fisici, che lavoravano nella ricerca fondamentale, a un materiale con applicazioni pratiche. Palermo ha descritto come i nanofogli 2D come il grafene possano essere processati, funzionalizzati e poi riasssemblati per creare nuovi compositi stratificati con utili applicazioni. Ha fornito una panoramica di nuovi compositi stratificati con struttura originale prodotti recentemente, con applicazioni nei settori dello stoccaggio di energia utilizzando litio e sodio e nella purificazione dei gas (Fig. 2) [7].

Anne-Marie Caminade ha incentrato il suo intervento sulle proprietà biologiche dei dendrimeri al fosforo "inorganici" [8]. Ha spiegato come, a seconda del tipo di funzioni terminali, i dendrimeri contenenti fosforo mostrino diverse proprietà, con

applicazioni in biologia e nanomedicina. I dendrimeri, a seconda della funzionalizzazione terminale, (gruppi fosfonato, complessi metallici o ioni ammonio, Fig. 3) mostrano proprietà antiinfiammatorie, antitumorali, o agiscono come vettori di farmaci [9].

Manuela Melucci (ISOF-CNR di Bologna) ha discusso della modifica chimica dei materiali a base di grafene per applicazioni ambientali. Ha presentato le applicazioni di grafeni modificati nella purificazione dell'acqua, nei sensori elettrochimici e nella carbocatalisi [10-12]. Ha dettagliato le recenti scoperte su strategie di progettazione e tecniche di funzionalizzazione covalente volte a creare nuovi materiali per: i) migliorare l'adsorbimento di contaminanti emergenti come PFAS e antibiotici dall'acqua potabile, ii) la trasduzione elettrochimica per il rilevamento precoce di pesticidi nell'acqua, e iii) la cattura e l'utilizzo di CO₂ in trasformazioni chimiche.

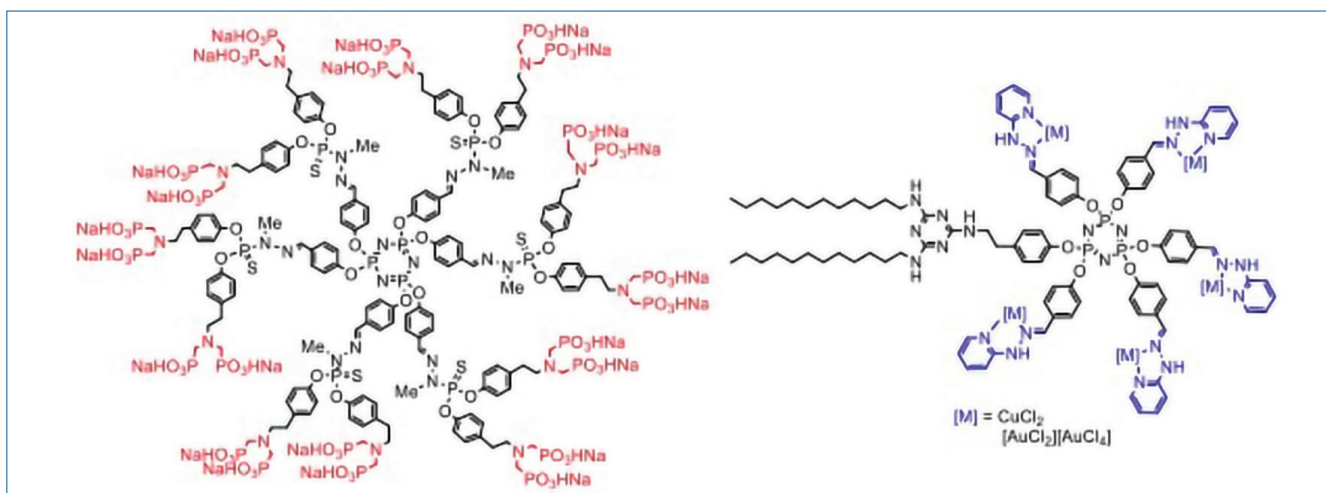


Fig. 3 - Due esempi di strutture dendritiche al fosforo con proprietà biologiche



Paola Stagnaro (ISMAC-CNR di Genova) ha presentato architetture macromolecolari ricche di zolfo, ottenute per vulcanizzazione inversa, come nuovi metamateriali per la nanofotonica. Ha spiegato come i polimeri con elevato contenuto di legami S-S altamente polarizzabili si siano rivelati promettenti come blocchi fotonici dotati di indice di rifrazione molto elevato ed eccellente trasparenza nella regione del vicino infrarosso. Il semplice processo di vulcanizzazione inversa senza solventi rappresenta, infatti, un metodo efficiente ed ecologico per riciclare lo zolfo elementare di scarto, come risorsa economica per ottenere materiali polimerici sostenibili e innovativi con proprietà funzionali uniche.

Barbara Vercelli (CNR-ICMATE) ha presentato uno studio sui *quantum dots* di carbonio a emissione blu, fornendo informazioni sull'effetto dei parametri di sintesi dell'approccio idrotermale. Ha selezionato l'approccio idrotermale per la sua fattibilità per future applicazioni industriali su larga scala, impiegando precursori ecologici che potrebbero essere ottenuti da rifiuti biologici. Attraverso indagini spettroscopiche, elettrochimiche e strutturali, ha studiato e discusso gli effetti dei parametri di reazione considerando la formazione di ossidi di azoto grafitico e il loro ruolo [13].

Matteo Grattieri (Università di Bari) ha presentato lo sviluppo di fotoanodi basati su batteri fotosintetici intatti per applicazioni energetiche e di monitoraggio dei contaminanti. Ha descritto un approccio sostenibile per ottenere una matrice di polidopamina redox-adesiva, che facilita simultaneamente il trasferimento di elettroni extracellulare fotoindotto, con una produzione di fotocorrente 5 volte maggiore, mantenendo i batteri a stretto contatto con le superfici degli elettrodi. Inoltre, ha presentato elettrodi biobased autoportanti, che hanno permesso di migliorare la colonizzazione batterica e un ulteriore aumento di 18 volte nella generazione di corrente [14].

Infine, Annamaria Petrozza (Istituto Italiano di Tecnologia) ha discusso dell'attività dei difetti nei semiconduttori perovskitici alogenuri metallici. Ha valutato i progressi più recenti volti a chiarire la (foto)chimica dei difetti legati alla composizione chimica dell'unità cristallina della perovskite, mostrando come essi definiscano la dinamica dei portatori di carica nel semiconduttore. Sulla base di tale comprensione, ha discusso le principali caratteristiche elettriche e

spettroscopiche legate all'attività dei difetti e come interpretarle per migliorare le figure di merito dei dispositivi optoelettronici e la loro stabilità.

In sintesi, la sessione *Smart Materials* ha fornito una piattaforma eccellente per lo scambio di idee e la presentazione di ricerche all'avanguardia nel campo dei materiali intelligenti, sottolineando il potenziale di questi materiali per affrontare sfide significative in vari settori, dalla medicina all'energia, dall'ambiente alla tecnologia.

BIBLIOGRAFIA

- [1] P. Nikolaou, E.L. Sciuto *et al.*, *Biosensors and Bioelectronics*, 2022, **209**, 114165.
- [2] M. Cingolani, E. Rampazzo *et al.*, *Environ. Sci. Nano*, 2022, **9**, 582.
- [3] V. Trovato, S. Sfameni *et al.*, *Molecules*, 2022, **27**, 5709.
- [4] N.J. Overeem, E. van der Vries, J. Huskens, *Small*, 2021, **17**, 2007214.
- [5] N.J. Overeem, P.H. Hamming *et al.*, *ACS Nano*, 2021, **15**, 8525.
- [6] R. Kolkman, L.I. Segerink, J. Huskens, *Adv. Mater. Interfaces*, 2022, **9**, 2201557.
- [7] Y. Sun, J. Sun *et al.*, *Chemical Communications*, 2023, **59**, 2571.
- [8] A.M. Caminade *et al.*, *Nature Comm.*, 2015, **6**, 7722.
- [9] Y. Zou *et al.*, *Biomacromolecules*, 2024, **25**, 1171.
- [10] S. Mantovani, T.D. Marforio *et al.*, *RSC Env. Science and Engineering*, 2023, 1030.
- [11] G. Moro, S. Khaliha *et al.*, *Materials Today Chemistry*, 2024, 101936.
- [12] A. Pintus, S. Mantovani *et al.*, *Chem. Eur. J.*, 2023, e202202440.
- [13] B. Vercelli *et al.*, *Electrochimica Acta*, 2021, **387**, 138557.
- [14] G. Buscemi, D. Vona *et al.*, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, **14**, 26631.

Smart Materials

The Smart Materials session within the SCI 2024 Congress, turned out to be an excellent opportunity for debate and discussion between academia and industry, providing a broad overview on the connection between structure and application potential of hard and soft materials.



Paola Montoro^a, Nadia Mulinacci^b

^aDipartimento di Farmacia, Università degli Studi di Salerno, Direttivo Divisione di Spettrometria di Massa (SCI)

^bDipartimento di Neurofarba, sez. di Farmaceutica e Nutraceutica, Università di Firenze,
Presidente Divisione Di Chimica degli Alimenti (SCI)

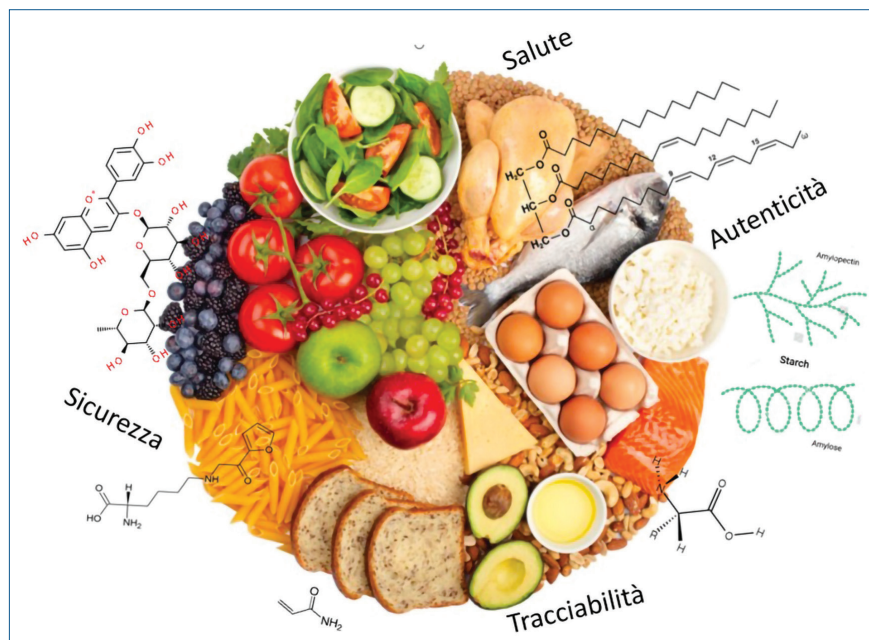
FOOD

Mercoledì 28 agosto 2024, all'interno del XXVIII Congresso Nazionale della SCI, si è svolta una giornata dedicata a sessioni parallele su diverse tematiche di ampia attualità in cui la chimica gioca un ruolo cruciale. La sessione 3 Food si è svolta in Sala Green ed è stata dedicata ai temi della qualità e della sicurezza alimentare, dei novel food, dei sottoprodotti e del packaging.

La Divisione Spettrometria di Massa della Società Chimica Italiana (DSM-SCI) e la Divisione di Chimica degli Alimenti si sono proposte come divisioni coordinatrici della sessione tematica Food, nelle persone di Nadia Mulinacci, per la Divisione di Chimica degli Alimenti, e di Paola Montoro, per la Divisione di Spettrometria di Massa. L'interdisciplinarietà ha caratterizzato la giornata, infatti sono state coinvolte diverse divisioni della SCI che hanno partecipato all'organizzazione della sessione: la Divisione di Chimica per le Tecnologie con Nadia Lotti, la Divisione di Chimica Analitica con Maria Careri, la Divisione di Chimica Farmaceutica con Stefano Alcaro, la Divisione di Chimica Fisica con Gerardino d'Errico ed il Gruppo interdivisionale di Risonanze Magnetiche con Vito Gallo. Tutte le sessioni parallele tematiche del Congresso SCI 2024 sono state organizzate con soli interventi di speaker invitati a tenere *keynote lectures*, ciascuna della durata di 30 minuti.

La giornata tematica, aperta dai saluti delle due coordinatrici, Nadia Mulinacci e Paola Montoro, ha mostrato quanto importanti siano le tematiche della qualità e della sicurezza alimentare, come le tecnologie estrattive ed analitiche siano strumenti cruciali per la ricerca in questi ambiti e come la ricerca contribuisca a valorizzare le eccellenze italiane. Parallelamente, si è discusso sulla produzione dei *novel foods*, sulle normative per il controllo degli alimenti e sui nuovi materiali per un packaging efficace e più sostenibile. Infine, sono stati mostrati casi studio su specifici alimenti di largo uso o noti come fonti di molecole bioattive, inclusi gli integratori alimentari ed è stato anche affrontato il tema del recupero e valorizzazione dei sottoprodotti dell'agri-food.

La prima sessione, moderata dalle stesse coordinatrici, ha visto la *keynote* di Nicola Zamboni del Polytechnical Institute of Zürich, ETH. Zamboni ha attratto l'uditorio con una *lecture* dal titolo "Mapping Metabolism in Action by Mass Spectrometry", mostrando come lo studio del metabolismo necessita l'utilizzo di diverse tecniche di spettrometria di massa. Zamboni ha discusso su limiti e ambiti di applicazione delle diverse metodiche evidenziando gli ostacoli ancora da superare per espandere ulteriormente le conoscenze nel campo. Ha infine presentato due approcci emergenti che ci aiuteranno a superare queste barriere: l'uso della *electron-induced dissociation* nella elucidazione strutturale e l'uso di traccianti isotopici per la quantificazione dei livelli di conversione metabolica in reti complesse. Gianni Sagratini con la ricercatrice Laura Alessandrini, ambedue dell'Università di Camerino, hanno presentato una *dual-keynote*, dal titolo "Proteomics in Food Research". Il relatore evidenzia come lo studio del proteoma e l'analisi bioinformatica sui dati ottenuti consente poi di differenziare i prodotti e verificare le funzioni delle proteine e dei meccanismi molecolari correlati. Tra le matrici alimentari, la carne è la più studiata con approcci proteomici sia per valutarne la qualità ma anche l'impatto di specifici sistemi di allevamento e di mangimi sui proteomi animali. Laura Alessandrini ha concluso l'intervento sottolineando come sia cruciale poter valutare l'impatto del tipo di allevamento attraverso la proteomica, discutendo i risultati di un caso-studio condotto sulle proteine di polli allevati in modalità diverse. La successiva *keynote* di Rosaria Cozzolino dell'Istituto di Scienze dell'Alimentazione del CNR di



Parma con la *lecture* “The Metrological Approach for the Future of Analytical Chemistry in Food Science: Issues, Synergies and Challenges”. La relatrice ha sottolineato l’importanza dell’applicazione di strumenti metrologici alle tecniche analitiche avanzate in risposta sia alle sfide in continua evoluzione sia alle sempre più stringenti richieste normative nel campo della sicurezza e della qualità alimentare, fornendo risultati conformi alla legislazione con la velocità e l’accuratezza che le parti interessate si aspettano. Inoltre, ha descritto l’importanza della tracciabilità metrologica e dell’affidabilità delle misure in condizioni reali per l’analisi di sistemi

Avellino, dal titolo “Volatomics and Postharvest Handling of Horticultural Crops”, ha presentato le potenzialità della Volatomics, un sottoinsieme della metabolomica che si occupa della caratterizzazione completa dei composti volatili per valutare la qualità delle colture orticole durante la conservazione commerciale. Ha inoltre evidenziato la complessa interazione di vari fattori basandosi sull’identificazione sia mirata che *untarget* di marcatori volatili potenzialmente associati alla freschezza del prodotto, utilizzando tecniche analitiche avanzate. A seguire, l’intervento di Luisa Mannina, dell’Università La Sapienza di Roma, dal titolo “NMR-based Metabolomics in Food Science”, ha sottolineato che nella metabolomica, la risonanza magnetica nucleare (NMR) è riconosciuta come una delle principali metodologie analitiche. L’intervento ha evidenziato come l’NMR è in grado di fornire informazioni spettroscopiche/strutturali *high-throughput* su molti metaboliti contemporaneamente e con elevata precisione analitica. Ha inoltre discusso alcune applicazioni sottolineandone punti di forza e di debolezza e la complementarità rispetto ad altre metodologie analitiche. Coautore della *keynote* è stato Anatoly P. Sobolev, Institute for Biological Systems, CNR, Monterotondo (RM). La seconda sessione, moderata da Paola Montoro con Gianni Galaverna dell’Università di Parma, è iniziata con la *keynote* di Maria Careri dell’Università di

complessi come sono gli alimenti.

La successiva *lecture* dal titolo “Agri-food Chain Legislation: Official Control in Italy”, è stata presentata da Emanuela Gregori dell’Istituto Superiore di Sanità di Roma. La relatrice ha presentato l’organizzazione della legislazione italiana in tema di sicurezza alimentare, evidenziando come l’Istituto Superiore di Sanità (ISS) sia il principale ente pubblico tecnico-scientifico del Servizio Sanitario Nazionale italiano. L’ISS, in qualità di laboratorio nazionale di riferimento per molte aree di attività, coordina i laboratori del Servizio Sanitario Nazionale impegnati nel controllo degli alimenti e dei mangimi e, in caso di controversie, esegue la seconda perizia. Coautore della presente *keynote* era Paolo Stacchini (ISS, Roma).

La successiva *keynote* è stata quella di Roberta Galarini, ricercatrice presso Istituto Zooprofilattico sperimentale dell’Umbria e delle Marche, dal titolo “Recent Trends of Allergen Analysis in Food”. Galarini ha mostrato come i metodi LC-MS, che si basano sulla rilevazione di peptidi proteotipici ottenuti dalla digestione enzimatica di proteine allergeniche, presentino diversi vantaggi, in particolare un’elevata selettività con l’identificazione definitiva dell’allergene. Poiché gli “analiti” iniziali sono le proteine, di sistemi complessi come gli alimenti, l’accuratezza può non essere sempre soddisfacente. La relatrice ha quindi presentato una breve



rassegna delle strategie di quantificazione applicate finora e sottolineando la necessità di avere adeguati standard analitici.

La seconda sessione ha visto anche la *keynote* di Chiara Dall'Asta, Università di Parma, dal titolo "How Food Chemistry Can Support the Safety Assessment of Novel Foods". La relattrice ha messo in evidenza alcuni aspetti delle norme vigenti, in particolare come sia stringente la descrizione chimica per la valutazione della sicurezza d'uso di un novel food, del suo potenziale allergenico e del suo profilo nutrizionale. Particolare enfasi è stata poi data alle fonti proteiche vegetali alternative ed a prodotti innovativi di origine vegetale ottenuti da sottoprodotti, evidenziando il ruolo chiave svolto dalle metodologie analitiche applicate alla conoscenza chimica del prodotto nella fase di valutazione del dossier effettuata dall'European Food Safety Authority (EFSA).

Nella successiva sessione, moderata da Arianna Rossetti del Politecnico di Milano, la *keynote* dal titolo "The Power of Analytical Chemistry for the Traceability of Italian Excellences", che vedeva come autrice Paola Dugo, è stata tenuta da Francesca

Rigano, ambedue dell'Università di Messina. La relattrice ha evidenziato, attraverso alcuni casi studio specifici, come l'applicazione di tecniche analitiche avanzate consenta la valorizzazione delle nostre eccellenze alimentari evidenziandone i profili peculiari compositivi. Rigano ha inoltre mostrato come le più recenti metodologie analitiche permettano di ridurre al minimo le procedure di preparazione del campione ottenendo tuttavia un'esauriente descrizione chimica delle sue caratteristiche.

L'intervento successivo è stato quello proveniente da una realtà aziendale che opera nel mondo della ricerca, l'Area Science Park AromaLab di Illy Caffè. Elena Guercia, ha presentato una relazione avente come coautore Luciano Navarini, dal titolo "Coffee Chemotaxonomy Markers: Focus

on Diterpenes". Guercia ha mostrato come la chimica sia uno strumento essenziale per affrontare il tema complesso della tassonomia del caffè. In particolare, è stato evidenziato come i diterpeni del caffè hanno sempre svolto un ruolo importante per l'autenticità e la tracciabilità del caffè. Ha mostrato, inoltre, come gli approcci chemiometrici siano utilizzati per studiare le specie di caffè coltivate, mentre ancora poco sappiamo della chemiotassonomia delle specie selvatiche del genere *Coffea*. La *lecture* ha mostrato il possibile utilizzo dei diterpeni, nel fornire informazioni utili anche sulle specie selvatiche di caffè che attualmente non sono di interesse commerciale ma che lo potranno essere in futuro.

La *lecture* successiva tenuta da Chiara Di Lorenzo dell'Università degli Studi di Milano ha trattato la tematica "Quality and Safety Aspects of Food Supplements". La relazione ha affrontato la complessa varietà dei "prodotti nutraceutici", prodotti volti a migliorare la salute dei consumatori appartenenti a diverse sotto classificazioni: alimenti arricchiti, alimenti funzionali, alcuni derivati della medicina tradizionale e integratori alimentari. Questi prodotti includono un largo spettro di ingredienti fra cui i pre-



parati botanici. La relatrice ha sottolineato come per garantire l'efficacia e la sicurezza dei prodotti nutraceutici siano necessarie rigorose misure di controllo della qualità *in primis* della materia prima e poi del processo. La *lecture* aveva come coautori Corinne Bani, Francesca Mercogliano e Patrizia Restani.

Infine, Simone Corradori ha presentato alla platea di uditori la sua relazione dal titolo "The Pomegranate Fruit: not just a Simple Food". Nella sua relazione Corradori ha mostrato un'ampia carrellata che è partita dagli aspetti botanici, per illustrare poi il profilo chimico e nutrizionali del melograno. Il relatore ha posto l'attenzione alle diverse parti del frutto, in particolare sulla buccia di melograno, scarto ottenuto durante la produzione del succo, evidenziando come questo sottoprodotto sia ricco in componenti bioattivi potenzialmente da usare per formulare integratori alimentari e non solo, offrendo nuove opportunità per l'industria alimentare e farmaceutica.

L'ultima sessione è stata moderata da Stefano Alcaro dell'Università Magna Greca di Catanzaro e da Nadia Lotti dell'Università di Bologna.

La prima *keynote* dal titolo "New Materials for Sustainable Food Packaging" tenuta dalla moderatrice, ha portato all'attenzione il caso degli imballaggi alimentari in plastica e il problema del loro impatto ambientale. Gli imballaggi in plastica garantiscono un'adeguata protezione degli alimenti, prolungandone la *shelf life* e riducono lo spreco alimentare. L'innovazione in chiave sostenibile dei materiali per l'imballaggio alimentare gioca un ruolo sostanziale all'interno di una composita serie di misure necessarie per risolvere questo complesso problema. In questo scenario, Lotti ha illustrato una panoramica dei risultati ottenuti dal suo gruppo sui polimeri a base di 2,5-furandicarbossilico (2,5-FDCA) progettati e sintetizzati per realizzare film per imballaggio alimentare, mostrando come la molecola sia uno dei 12 più importanti "biobased building blocks" da utilizzare per realizzare imballaggi monomateriale sostenibili, con eccellenti proprietà meccaniche e di barriera ai gas.

La relazione successiva è stata tenuta da Raffaella Boggia dell'Università di Genova, con il titolo "Upcycling of Fishery Unsorted Side-Streams: a Case Study". La relatrice ha presentato le sue ricerche nell'ambito del progetto EcoeFISHent, fi-

nanziato nell'ambito del programma Horizon 2020 - Green Deal (Innovation Action, Grant agreement ID: 101036428). Questo progetto mira a promuovere pratiche di economia circolare all'interno del settore ittico, con la particolarità di focalizzare gli sforzi intorno alla gestione e alla valorizzazione dei sottoprodotti della pesca. Nell'ambito del progetto è stato presentato come caso studio, un metodo scalabile rappresentato da un singolo diagramma di flusso a cascata per l'estrazione e l'*upcycling* di proteine da flussi secondari di tonno non selezionati (sia crudi che cotti), ma anche di altri sottoprodotti. Le biomasse di partenza erano costituite da una miscela disidratata di avanzi di tonno in scatola, stabilizzati attraverso una procedura innovativa brevettata a livello industriale per ottenere campioni da destinare a svariate applicazioni.

La relazione finale, presentata da Francesco Epifano dell'Università Gabriele d'Annunzio Chieti-Pescara dal titolo "Use of Lamellar Solids as a Novel Approach to Food Processing", ha presentato un approccio innovativo per il trattamento degli alimenti che consiste nell'uso di materiali adsorbenti solidi per il recupero e la concentrazione di metaboliti bioattivi di origine vegetale. Epifano ha mostrato alcuni esempi di materiali testati appartenenti a diverse classi chimiche con strutture stratificate, ossido e idrossido di magnesio e fillosilicati, ed alcune loro applicazioni. La relazione aveva come coautori Chiara Collevicchio, Serena Fiorito, Roberto Spogli e Salvatore Genovese.

Al termine dell'ultima sessione ci sono stati i saluti finali delle coordinatrici con i ringraziamenti per tutti i relatori che hanno contribuito al successo della sessione tematica Food, e a tutti i ricercatori intervenuti che hanno reso stimolante la discussione sulle tematiche trattate.

Food

Last August, on Wednesday 28, within the XXVIII National Conference of the Italian Chemical Society held in Milan at the Allianz Milano Convention Centre, a day was dedicated to Thematic Sessions on various topical issues in which Chemistry plays a crucial role. The Food session, that took place in Green Room 3, was dedicated to food quality and safety, novel foods, by-products and new packaging.



Alessandro Minguzzi,¹ Emanuela Licandro,¹ Mariaroberta Tersigni,² Paola Fermo,¹ Luigi Falciola¹
¹Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano
²ITT-LSA Ettore Molinari, Milano

LA SILENT ROOM

Il Congresso SCI 2024 ha trattato tematiche variegata, dalla ricerca industriale all'editoria scientifica, dalla protezione della proprietà intellettuale al lavoro della Polizia Scientifica, fino ai legami tra chimica e arte. Per due giorni alcuni interventi si sono svolti in uno "spazio" dinamico e innovativo: la Silent Room, un luogo di forte attrattiva che ha permesso un rapido ricambio di oratori e partecipanti, ideale per seguire presentazioni scientifiche in cuffia, tra un caffè e una visita agli stand.



Fig. 1 - La Silent Room: il moderatore, lo speaker, i partecipanti

Silent Room, una sala isolata acusticamente nell'area più viva di SCI 2024

Di "room" questo spazio ha ben poco, essendo una zona aperta, senza pareti, immersa ed integrata nell'ampio spazio espositivo del Congresso, delimitata unicamente dalle sedie per il pubblico

e dal palco per l'oratore. Pubblico e oratori sono stati dotati di cuffie che hanno consentito una reciproca comunicazione senza essere né disturbati dalle attività circostanti né disturbare le stesse (Fig. 1). L'organizzazione del programma, concentrato in due giornate (28 e 29 agosto), è sta-

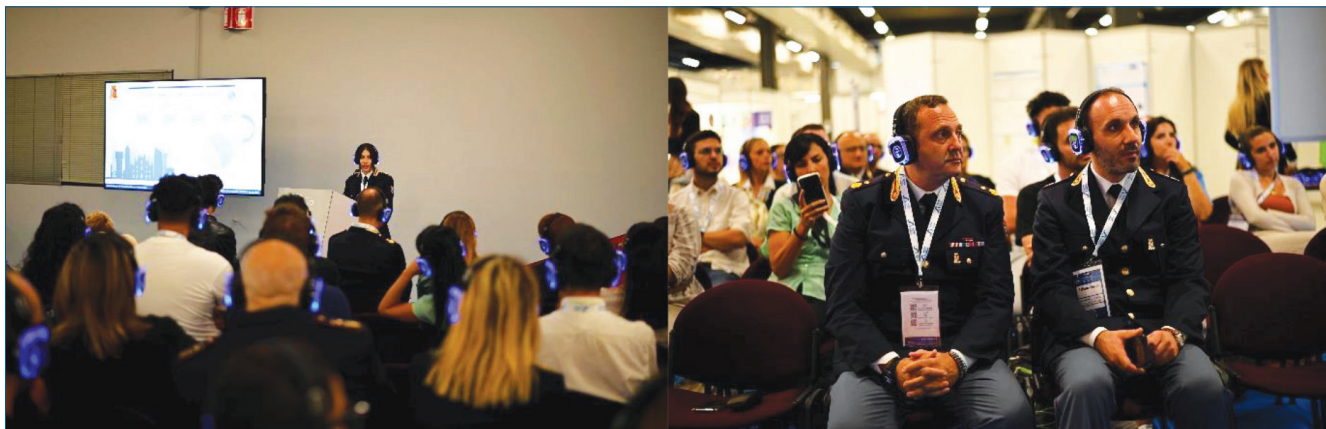


Fig. 2 - La Silent Room e gli interventi conclusivi della Polizia Scientifica

ta curata dal Direttivo della Sezione Lombardia. Gli interventi che hanno caratterizzato questo “spazio” sono stati di tipo più divulgativo e meno tecnico rispetto alle classiche conferenze scientifiche e quindi alle altre sessioni del Congresso. L’obiettivo è stato, infatti, quello di fornire ai partecipanti, in particolare ai giovani ricercatori, informazioni su tematiche di interesse generale e competenze trasversali, oltre che di metterli a conoscenza di sbocchi professionali in settori meno usuali, quali ad esempio quello della gestione della proprietà dei brevetti e della Polizia Scientifica (Fig. 2).

La Silent Room, posizionata tra i poster e gli stand degli sponsor, era quindi il luogo ideale per seguire interventi che difficilmente avrebbero trovato collocazione nelle altre sessioni del Congresso. La grande novità di quest’iniziativa risiedeva quindi nella sua flessibilità e vivacità: il ricambio dei partecipanti avveniva ad ogni presentazione e spesso coinvolgeva i rappresentanti delle aziende sponsor e i giovani impegnati nelle sessioni poster.

Negli orari centrali, la Silent Room è stata la sede per le presentazioni di posizioni aperte in gruppi di ricerca nazionali e internazionali per giovani ricercatrici e ricercatori.

Le tematiche, richiamate di seguito, hanno spaziato dalle sfide dell’editoria e dell’industria all’economia circolare, dalla chimica e arte alla didattica nei Paesi africani.

L’editoria scientifica sta attraversando un momento cruciale, come è stato ben raccontato da Haymo Ross, Chemistry Europe, che ha trattato l’argomento degli “Impact Factors and Publication Ethics - It’s All in the Day’s Work of an Editor”. Giulia Monclesi,

Elsevier, ha quindi affrontato il tema dell’intelligenza artificiale, delle sue potenzialità e dei relativi rischi in “AI in Chemistry: a Publisher Perspective”.

Il riciclo della plastica e, in particolare, del polietilentereftalato è stato affrontato in due contributi. Il primo di Roberto Tangorra, Mara Cantamessa e Attilio Margarucci, di Dentis Recycling Italy Srl, su “The Recycling of Pet Bottles: an Opportunity for the Italian System”, che hanno descritto le tappe necessarie a far tornare ad essere materia prima il PET proveniente da raccolta differenziata o da scarti di lavorazione.

Il secondo, da parte di Igor Toscani, Coripet, Consorzio volontario per riciclo del PET, con “Closed Circular Economy for the Collection and Recycling of PET Bottles”, ha illustrato una delle strategie in corso per incentivare il riciclo, basata su degli eco-compattatori per bottiglie, con la relativa analisi dell’accoglienza di tale (ottima!) iniziativa da parte dell’utenza.

Lo sviluppo industriale, le sfide delle imprese e i nuovi approcci alla sintesi e al riconoscimento e alla quantificazione delle sostanze chimiche sono stati elementi centrali dei lavori della Silent Room.

Paolangelo Cerea e Mattia Stucchi, Olon SpA, nei rispettivi interventi “Quality by Design Mantra - Olon’s Approach” e “Green Chemistry - Challenging Reactions in Aqueous Media”, hanno aggiornato i partecipanti sugli approcci adottati nella chimica fine per ottimizzare la sintesi di principi attivi mantenendo al contempo la dovuta attenzione all’impatto ambientale.

Björn Thoralf Erxleben e Domingo Pastran di Shimadzu con la presentazione su “Innovations since

150 Years up to Today, a Short Journey through History and Latest Developments”, hanno ripercorso la storia di quest’importante azienda, uno dei principali sponsor del congresso, con un focus sulle più recenti strumentazioni per la chimica analitica.

Elisa Capozzi, Michele Andriani e Mario Stefanelli, Sezione Chimica Confindustria Bari BAT, con la conferenza “La ricerca e l’innovazione dal punto di vista delle aziende” hanno portato alcuni esempi virtuosi di sviluppo di processi chimici di aziende della Regione Puglia, mentre Francesca Meroni, Italian and European Patent Attorney at Jacobacci & Partners SpA, con “Exploring Innovation: Patents as a Professional Horizon for Young Chemists” ha fornito una panoramica sul mondo della proprietà intellettuale e dei brevetti, spiegando come la figura del consulente brevettuale possa costituire un’interessante opportunità professionale per giovani chimici. Non esiste innovazione senza cooperazione: lo ha ricordato Fulvio Uggeri, Federated Innovation, che ha sensibilizzato i partecipanti su “Federated Innovation@MIND: A New and Powerful Opportunity to Realize Challenging Ideas”, descrivendo l’ecosistema e le strategie per l’innovazione previste per catalizzare la collaborazione sinergica tra aziende, centri di ricerca, associazioni di categoria e università, geograficamente centrato sul nuovo distretto dell’Innovazione che sta sorgendo alle porte di Milano.

Michele Raggio, SeedScience “Science Education from the African Continent” ha descritto il progetto di collaborazione con ONG locali, formando gli insegnanti di scienze per adottare un metodo di insegnamento divertente e pratico che renda gli studenti i veri protagonisti, mediante materiali economici, riciclati e disponibili localmente e collegando i temi dell’insegnamento ai problemi e alle opportunità della vita quotidiana della comunità.

Maria Pomiansky, pittrice, ha trattato il tema, intrinsecamente transdisciplinare, di “Art for Chemistry”, facendo parte di un progetto che vede l’arte come ispirazione per gli scienziati e, viceversa, trae ispirazione dai temi scientifici quali soggetti delle opere. Le opere della pittrice sono state esposte nel corso del Congresso, un “assaggio” della sessione sulla chimica e l’arte prevista in chiusura di programma. In modo complementare, Arianna Beretta, direttrice della Scuola Restauro Botticino, ha parlato di “The Culture of Restoration. Applications between The-

ory Experiences and Laboratory Activities”, evidenziando l’interdisciplinarietà delle tematiche che un restauratore dovrebbe affrontare sia nel corso dei suoi studi che nella futura professione. La Chimica, ovviamente, è una (fondamentale) di queste discipline. La parte finale del programma è stata dedicata ai contributi della Polizia Scientifica, con una conferenza di Chiara Ciccarelli, Commissario Capo Tecnico della Polizia di Stato del Gabinetto Regionale Polizia Scientifica di Milano su “Integrazione tra tecniche analitiche GC-MS, FTIR e NMR benchtop per l’identificazione forense di nuove sostanze psicoattive: un caso studio”, sottolineando le sfide tecniche necessarie per permettere alle Forze dell’Ordine di riconoscere le nuove sostanze stupefacenti in seguito al loro inserimento nelle tabelle ufficiali.

Lucio Diego Bencivinni, Commissario Capo Tecnico della Polizia di Stato del Servizio Polizia Scientifica di Reggio Calabria, ha trattato le “Tecniche chimico-fisiche di evidenziazione di impronte latenti in ambito forense”, alcune delle quali potevano anche essere osservate all’opera nel molto frequentato stand della Polizia Scientifica.

Infine, Sabato Volino, Commissario Capo Tecnico della Polizia di Stato del Gabinetto Regionale Polizia Scientifica di Reggio Calabria, ha discusso le potenzialità de “La gascromatografia nella determinazione di fake hashish in campo forense”, analizzando un recente, interessante caso che ha impegnato la Polizia Scientifica e le procedure di riconoscimento precedentemente descritte.

Un’esperienza nuova per un Congresso SCI, quella della Silent Room, che ha contribuito ad aggiungere dinamismo e offerta tematica.

The Silent Room

The SCI 2024 Congress covered a variety of topics, from industrial research to scientific publishing, from the protection of intellectual property to the work of the Scientific Police, to the links between chemistry and art. During two days some speeches took place in a dynamic and innovative “space”: the Silent Room, a highly attractive place that allowed a rapid turnover of speakers and participants, ideal for following scientific presentations with headphones, between a coffee and a visit to the stands.

Vuoi essere sulla rivista che da più di 100 anni si occupa della **Chimica in Italia?**



PIANO EDITORIALE 2025

NUMERO	TEMA PRINCIPALE	DISPONIBILE ONLINE
► n. 1/2025 gennaio/febbraio	La chimica nell'accumulo elettrochimico di energia: batterie e materiali critici	20 febbraio
► n. 2/2025 marzo/aprile	Intelligenza artificiale e chimica	22 aprile
► n. 3/2025 maggio/giugno	PFAS	20 giugno
► n. 4/2025 luglio/agosto	Anidride carbonica: risorsa o rischio?	5 settembre
► n. 5/2025 settembre/ottobre	Nuove sfide della chimica	24 ottobre
► n. 6/2025 novembre/dicembre	Chimica forense e nuove tecnologie	16 dicembre



C'è SPAZIO anche per la tua Azienda!

Per proposte pubblicitarie personalizzate contattare
domenicacipriani@agicom.it



LA MECCANICA QUANTISTICA E IL RISCALDAMENTO GLOBALE

Il riscaldamento globale nasce dall'aumento della concentrazione di gas serra, in particolare del diossido di carbonio: molti si meravigliano di come poche centinaia di ppm di gas possano tanto. Ridiscutiamo qui la saturazione dell'assorbimento IR e, novità, il ruolo della risonanza di Fermi, che i chimici conoscono bene per il suo ruolo analitico. Sono vecchi fenomeni ma visti sotto una nuova luce.

Uno dei problemi legati alla divulgazione del tema climatico è la complessità dei fenomeni implicati nei vari processi, a fronte di un argomento, quello del clima, che apparentemente sembra facile e di immediata comprensione. Il sistema climatico è, invece, propriamente, **un sistema complesso**, dipendente da molte variabili legate da relazioni non lineari tra le diverse variabili che lo dominano a diverse scale spaziali e temporali e, dunque, con molte retroazioni, ossia con processi che causano e sono causati da altri, in un *loop* complesso da analizzare e molto difficile da spiegare.

A causa di questa complessità, per mostrare e dimostrare il riscaldamento globale, gli specialisti usano non soltanto singole formule, ma programmi di calcolo che modellano il sistema climatico nella sua interezza, con tutte le sue variabili e i suoi processi dinamici e termodinamici; la conseguenza di un tale approccio modellistico, che necessariamente semplifica e razionalizza le variabili in gioco, è la fiducia che è sempre necessaria nel momento in cui la spiegazione dei fenomeni diventa "mediata": la sfiducia diventa il contraltare, specie di quei colleghi, che casomai sono specialisti di altri settori e che non comprendono immediatamente l'approccio modellistico, non riescono a vederne tutti gli aspetti; a maggior ragione il grande pubblico che, a volte, ignora le basi di tali approcci, analizzati con precisione e supportati da calcoli numerici.

Il principale database per la determinazione dell'assorbimento dei gas serra in atmosfera (HITRAN) di-

scende anche dalle misure fatte dall'esercito americano al tempo del secondo conflitto mondiale insieme con **l'aviazione britannica** per capire come l'assorbimento infrarosso (IR) in alta atmosfera alterasse la determinazione dei bersagli. Tali dati sperimentali, sui quali è stata costruita la teoria dell'assorbimento, sono più complessi del già non banale uso della **legge di Lambert-Beer di cui abbiamo discusso in passato** (un commento dettagliato si trova nel **2° post di Real Climate** citato in fondo).

Esemplificativo appare il fenomeno della saturazione atmosferica, ossia del fatto che, in assenza di corrette ipotesi, può apparire lecito credere che l'assorbimento di radiazione infrarossa da parte dell'atmosfera terrestre non possa superare certi valori; conseguentemente potrebbe apparire lecito supporre che l'idea che la CO₂ e altri gas serra *in aumento* controllino l'assorbimento di calore non sia valida.

Il primo a fare questa obiezione fu Knut Ångström (fisico svedese, figlio di un altro fisico, altrettanto famoso)^a al cui cognome fa riferimento l'unità di misura delle lunghezze atomiche.

L'obiezione di Ångström, fisico eccellente, ebbe un peso notevole, rendendo più difficile l'accettazione dell'idea di Eunice Newton Foote (1856), che per prima aveva ipotizzato l'importanza dell'assorbimento infrarosso (anni fa provai a riprodurre il suo esperimento ma senza riuscirci, si veda a questo riguardo **il recente libro di Gianfranco Pacchioni**, l'esperimento non era probabilmente ben definito). L'idea della Foote fu ripresa da due pesi massimi

^aK. Ångström, Ueber die Bedeutung des Wasserdampfes und der Kohlensäure bei der Absorption der Erdatmosphäre (On the importance of water vapor and carbonic acid in the absorption of Earth's atmosphere), *Ann. Phys.*, 1900, **308**, 720, <https://doi.org/10.1002/andp.19003081208>. La polemica si può seguire anche consultando l'articolo in inglese <https://journals.ametsoc.org/view/journals/clim/33/9/jcli-d-19-0193.1.xml>



della scienza ottocentesca: il fisico anglo-irlandese John Tyndall, che misurò per primo esattamente l'assorbimento scoperto da Foote (si veda **qui** un racconto dettagliato), stupendosi del ruolo notevole che piccole quantità di CO₂ (insieme con il vapore acqueo) avevano sull'assorbimento della 'radiazione oscura', l'antico nome dell'IR, e poi dal celebre lavoro di Svante Arrhenius nel 1896 (40 anni dopo Foote), che consacrò il ruolo riscaldante dei gas serra per la superficie terrestre. Come scrissi già in un **precedente post**: "Il primo lavoro che ha sospettato questo processo (l'importanza dell'aumento di CO₂ in atmosfera) non è quello più famoso di Arrhenius, ma quello di Arvid Högbom, un geochimico svedese che lo ispirò"; in una lezione del 1893 in seno alla Stockholm Högskola dedicata ai principali meccanismi di accumulo di CO₂ in atmosfera, ampiamente accreditata come l'evento ispiratore di Arrhenius, Högbom enumera tra i processi sorgente il vulcanismo, il rilascio di CO₂ disciolta negli oceani e la combustione e la decomposizione di materia organica. Nella combustione, Högbom cita chiaramente l'utilizzo di carbone per le attività umane.

Nel 1894 egli scriveva^b (in svedese, così che l'idea rimase confinata, ma fu raccolta da Arrhenius che immaginò, per primo, che l'effetto finale di queste gigantesche emissioni sarebbe stata l'aumento della temperatura terrestre...): "L'attuale produzione globale di carbon fossile è in cifre tonde di 500 milioni di tonnellate all'anno, o 1 tonnellata per km² di superficie terrestre. Trasformata in CO₂ questa quantità di carbone rappresenta circa la millesima parte della CO₂ totale dell'aria".

Il lavoro di Högbom implicava emissioni globali di CO₂ dalla combustione del carbone di circa 1,8 GtCO₂ nel 1890. Nonostante fosse chiaramente piuttosto approssimativo, questo primo sforzo era notevolmente vicino alla stima contemporanea delle emissioni da carbone all'epoca, circa 1,3 GtCO₂.

A fronte delle solide basi geofisiche e chimiche poste da Foote/Tyndall, e poi da Hogbom e Arrhenius, **un articolo di Ångström** fu accolto **molto favorevolmente**: ad esempio "In esso, basandosi su ricer-

che inedite del Dr. J. Koch a Uppsala, sull'assorbimento di radiazioni emesse da sorgenti di calore a diverse temperature da parte di vari spessori di gas, il prof. Ångström determina approssimativamente l'influenza di uno strato diossido di carbonio gassoso di 30 centimetri di spessore e sotto una pressione di 750 millimetri, che assorbe la radiazione di un corpo nero a 100 °C di temperatura e trova che è di circa il 10 per cento e che non cambia più di tanto, non più di quattro decimi dell'uno per cento della radiazione originale quando la pressione viene ridotta a 520 millimetri. Egli deduce, quindi, che uno strato così spesso da essere equivalente a quello contenuto nell'atmosfera terrestre assorbirà circa il 16% della radiazione terrestre e che questo assorbimento varierà di pochissimo con qualsiasi variazione della proporzione di gas diossido di carbonio nell'aria".

Questa la famosa 'obiezione di Ångström', ripetuta talvolta più o meno maldestramente e con più o meno cognizione di causa, da chi ancora oggi cerca di appigliarsi a qualunque cosa pur di non guardare in faccia dati, scienza e modelli e il consenso scientifico sul riscaldamento globale antropogenico. Ma come stanno le cose visto che oggi ne sappiamo molto più di quanto non ne sapesse Ångström e considerato quanto la fisica e la chimica sono avanzate dai primi del Novecento?

Anzitutto Koch usò una sorgente a 100 °C, poi usò un gas alla pressione di 1 atmosfera e senza gli effettivi componenti dell'atmosfera. Tali diverse condizioni iniziali modificano il risultato finale in modo significativo: il coefficiente di assorbimento nel complesso tende a diminuire linearmente con la pressione ed in modo diverso se usiamo un gas della medesima composizione o con i componenti effettivi dell'atmosfera. Trasferendo i risultati di Koch su un grafico che esprime la nostra attuale conoscenza delle cose troviamo il risultato riportato in Fig. 1 (i due punti rossi sono i risultati di Koch). Come si vede, mentre l'effetto di variazione della concentrazione del gas serra è notevole, Koch misura due punti molto vicini e fraintende completamente il risultato. Non c'è affatto assorbimento completo ed esso varia significa-

^b"On the probability of secular changes in the level of atmospheric CO₂" (original title: "Om sannolikheten för sekulära förändringar i atmosfärens kolsyrehalt") pubblicato nel 1894 in *Svensk Kemisk Tidskrift* (*Swedish Chemistry Journal*). Per un'analisi accurata di questo si veda <https://folk.universitetetioslo.no/roberan/t/EarlyEstimates1.shtml>

^cIl lavoro del 1894 di Arvid Högbom segue una sua lezione del 1893, cui partecipò anche Arrhenius come uditore. È la lezione dell'ispirazione di Arrhenius all'applicazione dei processi superficiali di emissione della CO₂ all'incremento della temperatura terrestre. La lezione si intitola, in svedese, Naturens varmeshushallning: a seconda di come si interpreta il secondo termine, abbiamo "Immagazzinamento di calore nella natura" oppure "processo della serra della natura". Ringrazio Gianluca Lentini (Polimi) per questa nota.

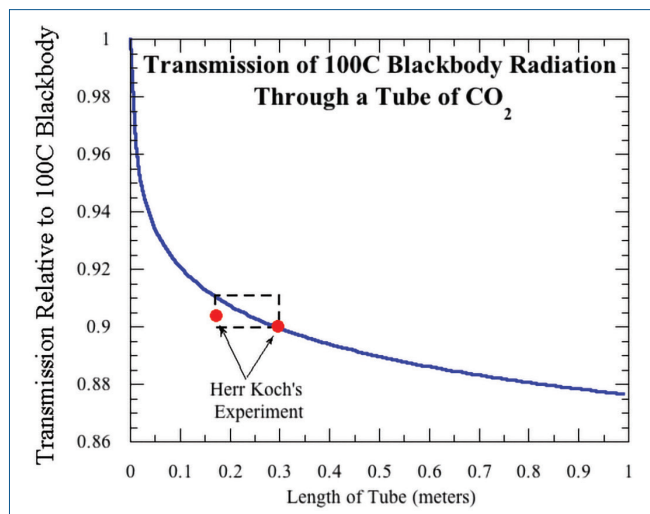


Fig. 1 - Grafico da [Il post di RealClimate](#). In sostanza, Koch ritiene trascurabile un effetto che trascurabile non è, nell'atmosfera reale e anche nel suo stesso esperimento, ricalcando l'idea di Ångström di un effetto di saturazione nella capacità dell'atmosfera di incamerare radiazione IR attraverso i propri gas serra, e nello specifico attraverso la CO₂ antropogenica

tivamente con lo spessore. Lo spessore equivalente dell'atmosfera in termini di gas serra sarebbe dell'ordine di 1,25 metri.

Ci dà ragione del perché l'obiezione di Ångström e Koch sia ormai ampiamente superata anche il fenomeno della risonanza di Fermi e del suo ruolo nello spettro infrarosso della CO₂. La risonanza è un fenomeno intrigante e misterioso già in meccanica classica e i suoi meccanismi vengono studiati ancora oggi: un esempio [nel bel filmato illustrativo](#) 'Pendoli risonanti'. Attaccando due pendoli ad un filo (a sua volta sospeso "a catenaria", non tirato rigidamente) i due pendoli *a certe condizioni* entreranno in risonanza

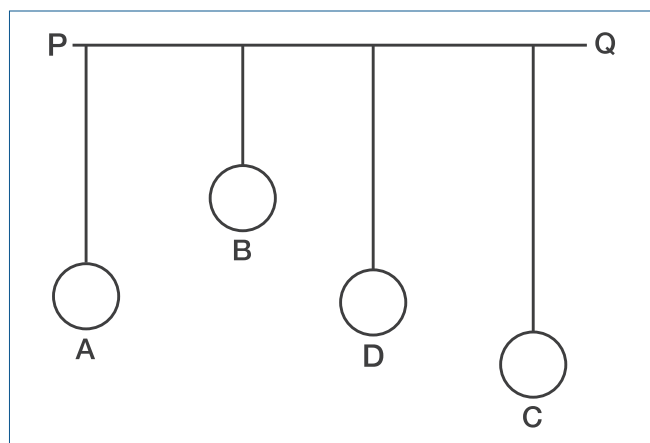


Fig. 2 - La corda PQ è tesa ma non perfettamente rigida (ha genericamente forma di catenaria); i pendoli A e D entrano in risonanza mentre B e C no

ossia si influenzeranno reciprocamente, si scambieranno energia. Le condizioni sono 1) che esista un legame fisico (la sospensione a catenaria) e 2) la lunghezza dei pendoli. Se i pendoli sono sospesi ad un filo molto rigido o sono di lunghezze molto diverse il fenomeno non si verificherà affatto (Fig. 2).

In meccanica quantistica, sviluppata a partire dai lavori di Max Planck e Albert Einstein dei primissimi anni del Novecento, ha luogo un fenomeno analogo, con condizioni specifiche ovviamente diverse. I sistemi quanto-meccanici sono descritti da funzioni d'onda, sono dunque intrinsecamente oscillanti e i processi che si svolgono a livello molecolare (nella CO₂ o in qualunque altra molecola), come le vibrazioni o le emissioni elettroniche, possono con ottima approssimazione essere assimilati al fenomeno dei pendoli, collegati attraverso la struttura della molecola. È lecito attendersi, quindi, interazioni fra questi processi di oscillazione che sono, *in particolare*, le vibrazioni molecolari, tra i processi che assorbono ed emettono energia, particolarmente interessanti, dato che il loro livello di energia corrisponde alle radiazioni infrarosse.

La risonanza di Fermi è un fenomeno per il quale due diverse frequenze di oscillazione (nel nostro caso nel campo dell'IR), possono interagire e scambiarsi energia di assorbimento.

La risonanza di Fermi provoca la divisione di due bande vibrazionali che hanno quasi la stessa energia e simmetria sia nelle spettroscopie IR sia in quelle Raman. Le funzioni d'onda delle due vibrazioni risonanti si mescolano (secondo l'approssimazione

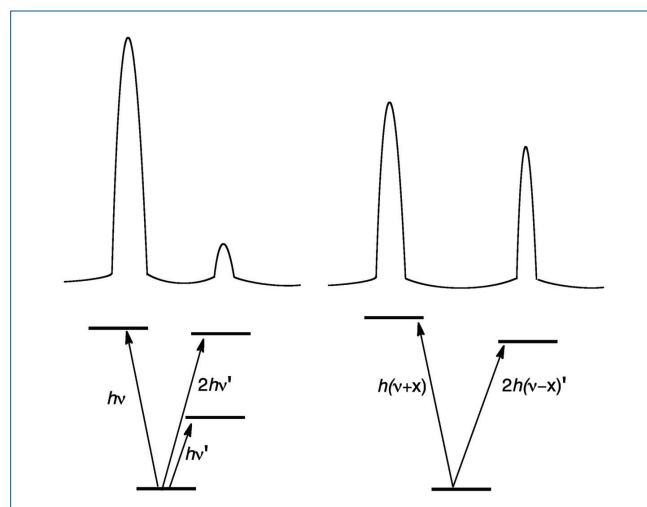


Fig. 3 - Schema di un modo normale di vibrazione e di un sovratono prima e dopo la risonanza di Fermi. In basso lo schema dei livelli energetici (da Wikipedia)



Per approfondire

Con riferimento all'immagine di Fig. 4: due diverse frequenze di oscillazione possono interagire e scambiarsi energia di assorbimento se i sovratoni (ossia gli stati eccitati) di una hanno un'energia che coincide con la frequenza base di un'altra; nel nostro caso le due frequenze interessate sono quella a 7,5 mm (1337 cm^{-1} , lo stretching o stiramento simmetrico, in genere debole a causa della sua simmetria elettrica, che non fa variare il momento dipolare, il che gli impedisce di assorbire bene), qui indicata come ν_1 , e il primo sovratono di quella a 15 mm (667 cm^{-1} , dunque con primo sovratono a 1334 cm^{-1} , il doppio di frequenza ed energia, questo è il bending (deformazione) simmetrico o *scissoring*) indicata come ν_2 ; le due frequenze e, dunque, le loro energie diventano molto vicine ed interagiscono, essendo sulla medesima molecola e con simmetrie compatibili.

Quanto sopra viene riportato in un classico della spettroscopia (*Symmetry and spectroscopy* di Harris e Bertolucci, pag. 167, vedi Fig. 5) e vi lascio il tono e la battuta finale in inglese.

La prima parte esprime quanto visto sopra; la seconda parte la traduco per comodità: *Questo mescolamento, chiamato risonanza di Fermi, ha due effetti: (1) il sovratono può guadagnare intensità dalla vicina fondamentale della stessa simmetria; e (2) entrambi i livelli energetici sono spostati l'uno dall'altro. Invece di osservare una banda forte a 1337 cm^{-1} e una banda debole a 1334 cm^{-1} , nello spettro Raman si osservano due bande forti a 1388 e 1286 cm^{-1} . Naturalmente lo spettro non si presen-*

ta dicendo: "Guardate questa meravigliosa risonanza di Fermi!". L'interpretazione delle due bande forti è proprio questa: un'interpretazione. Questi trabocchetti nella spettroscopia sono comuni".

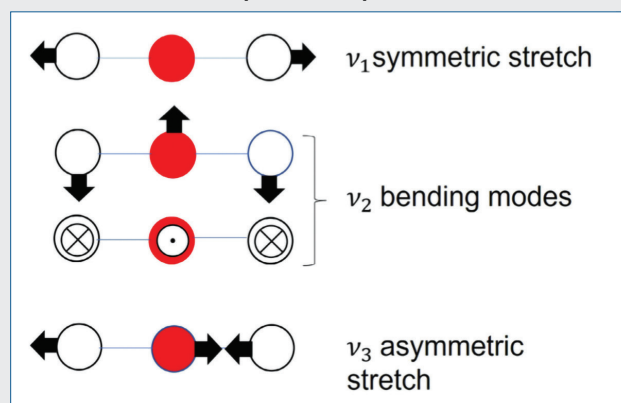


Fig. 4 - Questa è la fig. 1 del lavoro citato. Schema dei modi fondamentali di vibrazione della CO_2 . Il primo e il terzo sono di stiramento simmetrico ed asimmetrico mentre il secondo, la deformazione, può aversi in due modalità una nel piano del foglio ed una perpendicolarmente ad esso

Although overtones and combination bands are generally much less intense than fundamental transitions, an "intensity borrowing" mechanism is possible which can add intensity to otherwise weak absorptions. In CO_2 , for example (Fig 3-33), ν_1 (σ_g^+) should be found at 1337 cm^{-1} and ν_2 (π_u) occurs at 667 cm^{-1} . The first overtone of ν_2 , with symmetry species $\sigma_g^+ + \delta_g$ (by use of Appendix C) is expected near $2 \times 667 = 1334\text{ cm}^{-1}$. However, quantum mechanics allows a "mixing" of the two σ_g^+ states expected at 1337 (ν_1) and 1334 ($2\nu_2$) cm^{-1} . This mixing, called *Fermi resonance*, has two effects: (1) The overtone can gain intensity from the nearby fundamental of the same symmetry; and (2) both energy levels are shifted away from each other. Instead of observing a strong band at 1337 cm^{-1} and a weak band at 1334 cm^{-1} , two strong bands are observed in the Raman spectrum at 1388 and 1286 cm^{-1} . Of course the spectrum does not run up to you and say, "Look at this marvelous Fermi resonance!" The interpretation of the two strong bands is just that—interpretation. Such pitfalls in spectroscopy are commonplace.

Fig. 5

dell'oscillatore armonico) e il risultato è uno spostamento di frequenza e un cambiamento di intensità nello spettro elettromagnetico. Di conseguenza, nello spettro si osservano due bande forti, invece delle bande, una forte e una debole, previste, in sostanza con un'amplificazione dell'effetto delle singole bande (Fig. 3). Non è possibile determinare il contributo di ciascuna vibrazione a causa della risultante funzione d'onda mista. Se i requisiti di simmetria sono soddisfatti e le energie dei due stati sono simili, avviene la miscelazione **e le modalità risultanti possono essere descritte da una combinazione lineare delle due modalità intergenti.**

La risonanza di Fermi, particolarmente significativa in sistemi come le aldeidi, l'acqua o il grafene, è fon-

damentale per ottenere informazioni sulle proprietà strutturali e dinamiche delle molecole in vari ambienti, interpretando con precisione i dati della spettroscopia vibrazionale. Il fenomeno gioca un ruolo fondamentale nel chiarire le interazioni di legame a idrogeno, come quelle osservate nei gruppi funzionali carbonilici e nitrilici, e nello spiegare i picchi anomali negli spettri Raman, come quelli osservati nel grafene con nanoparticelle di cromo. Un approfondimento potete trovarlo nel riquadro.

L'argomento di cui parliamo è stato ripreso di recente nel lavoro di **Shine e Perry**, in cui gli autori, dopo una presentazione generale degli aspetti spettroscopici che abbiamo discusso, fanno i calcoli di assorbimento riga per riga negli intervalli di interesse per la CO_2 .

FIGURE 5 Radiative forcing (in $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot (\text{cm}^{-1})^{-1}$) in each 10 cm^{-1} band for an increase in CO_2 mole fraction from 410 to 820 ppm. In each frame the bold dashed line shows the total forcing when all vibrational bands of all CO_2 isotopologues are included. (a) Forcing from the fundamental ν_2 band (solid line) and when ν_2 hot bands (dashed) of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ are added. (b) Forcing when the first (solid line) and second Fermi (dashed) bands of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ are added. (c) Forcing when the Fermi-Fermi bands (solid line) of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ are added. (d) Forcing when all $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ bands (solid line) are added.

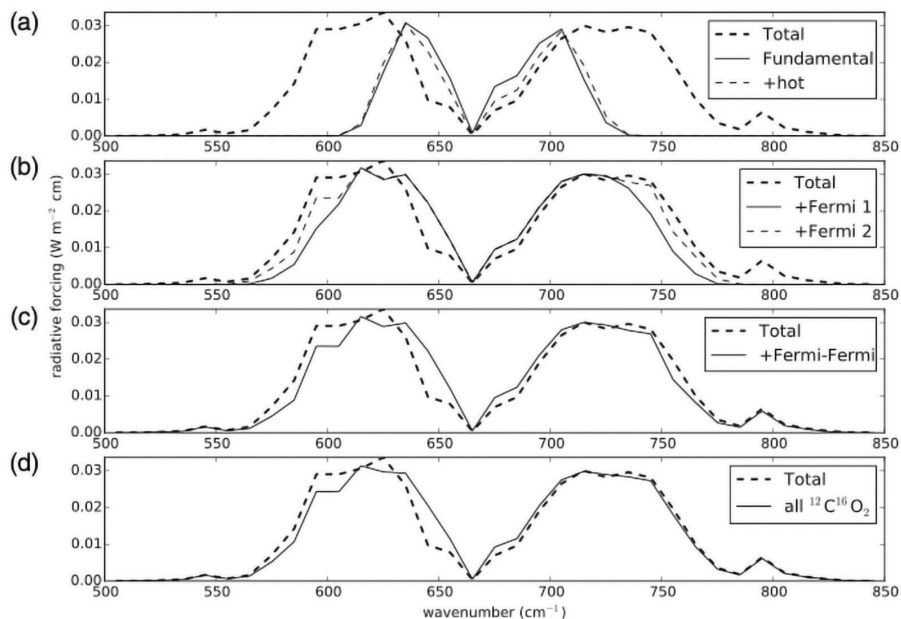


Fig. 6 - La figura (è anche la 5 dell'articolo citato) mostra come aumenti il forcing radiativo della CO_2 man mano che si aggiungono le risonanze di Fermi possibili nella molecola. La linea tratteggiata definita Total e corrispondente al risultato finale è presente in ogni figura come confronto

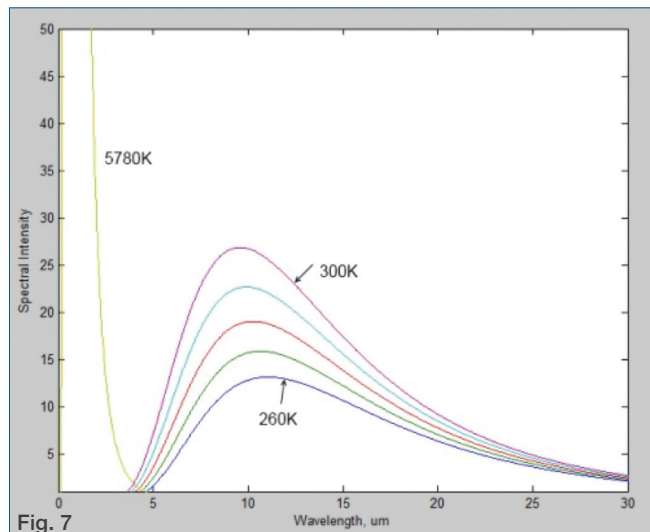
Cerchiamo di spiegare con maggiore dettaglio questo punto.

L'abstract dell'articolo citato ne riassume il senso (vedi anche Fig. 6): *Questo articolo presenta un'analisi dei calcoli di trasferimento radiativo che quantificano il ruolo di diverse transizioni vibrazionali e illustra che, mentre il modo fondamentale di piegatura contribuisce a quasi il 90% dell'intensità totale dell'infrarosso, contribuisce a meno della metà della forzante radiativa (RF) alle attuali concentrazioni di CO_2 ; ciò è dovuto al fatto che l'assorbimento al centro di questa banda fondamentale è così intenso che l'effetto della CO_2 aggiuntiva è fortemente attenuato. Aggiungendo successivamente altre bande di CO_2 ai calcoli, si dimostra che un fenomeno spettroscopico chiave, noto come risonanza di Fermi (un'interazione tra gli stati eccitati dei modi di flessione e di stiramento simmetrico della CO_2), porta a una diffusione significativa dell'intensità dell'infrarosso a numeri d'onda più alti e più bassi, dove il modo di flessione fondamentale è meno importante. Le transizioni di risonanza di Fermi contribuiscono solo al 4% circa dell'intensità totale dell'infrarosso in questa regione spettrale, ma causano più della metà dell'attuale*

forzante radiativa. Gli isotopologi meno abbondanti della CO_2 hanno un impatto minimo sulla RF integrata nello spettro, ma questo piccolo contributo deriva da una compensazione tra contributi positivi e negativi più significativi alla RF spettrale. Questo lavoro non altera i risultati dei calcoli dettagliati della RF disponibili in letteratura; piuttosto, aiuta a spiegare le basi fisiche di tale forzatura (il termine isotopologi usato nel testo si riferisce a quelle molecole di CO_2 , in cui gli atomi non sono gli isotopi più abbondanti). È questa specifica risonanza nella molecola di CO_2 a impedire ogni tipo di 'saturazione' della stessa ai pacchetti energetici IR provenienti dal suolo, e ad amplificare la risposta radiativa della CO_2 in atmosfera, con conseguente riscaldamento al suolo.

L'effetto è stato anche presentato nella letteratura divulgativa, spesso con grossolani errori; per esempio in un [sito meteo](#), si ripete più volte un errore pacchiano, ossia che l'emissione infrarossa assorbita dalla CO_2 provenga dal Sole; in realtà l'emissione infrarossa assorbita dalla CO_2 proviene dalla Terra, che nelle vicinanze del pianeta è il principale emettitore infrarosso, molto più potente del Sole; se prendiamo come riferimento lo strato superiore dell'at-

^dE. Fermi, Über den Ramaneffekt des Kohlendioxyds, *Z. Physik*, 1931, **71**, 250, <https://doi.org/10.1007/BF01341712> disponibile sul sito dell'Accademia dei Lincei con le opere di Fermi: <http://operedigitali.lincei.it/Fermi/>; Titolo: Informazioni sull'effetto Raman dell'anidride carbonica Riasunto: Lo spettro Raman della CO_2 è spiegato teoricamente; è dimostrato che la comparsa di due linee Raman, laddove secondo il modello della molecola di CO_2 ci si aspetterebbe solo una, può essere attribuita a una quasi-degenerazione casuale di due livelli di vibrazione (*traduzione dell'A.*)



mosfera (il cosiddetto TOA, Top of Atmosphere, lo strato atmosferico più alto dove c'è un bilancio radiativo fra l'energia solare entrante e quella uscente) avremo *approssimativamente* l'andamento riportato in Fig. 7 alle varie lunghezze d'onda: il Sole domina sotto 5 micron e la Terra sopra (nella Fig. 7 il calcolo è esemplificato dalle curve di corpo nero a diverse temperature).

In conclusione l'argomento della risonanza di Fermi non è affatto nuovo, ma è estremamente significativo, pur essendo sconosciuto agli stessi climatologi, che lo illustrano applicandolo alla CO_2 , come "una scoperta" meritevole di nuovi lavori; in realtà Fermi lo illustrò nel 1931^o proprio usando come esempio il medesimo gas, gli studenti di chimica lo studiano in ogni esame di spettroscopia o di chimica analitica strumentale applicato a varie specie organiche, Tuttavia il contatto fra chimici e climatologi è a volte scarso, come succede spesso nella ultraspecializzata e ultrasellettiva scienza basata sul merito numerico oggi, per cui la sua applicazione al bilancio radiativo dell'atmosfera, già presente in ogni programma di calcolo serio, non appare espli-

Quantum Mechanics and Global Warming

Global warming arises from the increased concentration of greenhouse gases particularly carbon dioxide; many people marvel at how a few hundred ppm of the gas can do so much. We discuss again here the saturation of IR absorption and, new, the role of Fermi resonance, which chemists are familiar with for its analytical role. These are old phenomena but analysed under a new light.

citamente e quindi capirlo ed usarlo esplicitamente sembra una novità. Speriamo serva ad evitare gli assurdi commenti dei "battagliamenti" di turno. Ahimè.

Ringraziamenti

Ringrazio per gli utili suggerimenti Gianluca Lentini (UniMi), Marina Vitullo (ISPRA) e Laura Tositti (UniBo)

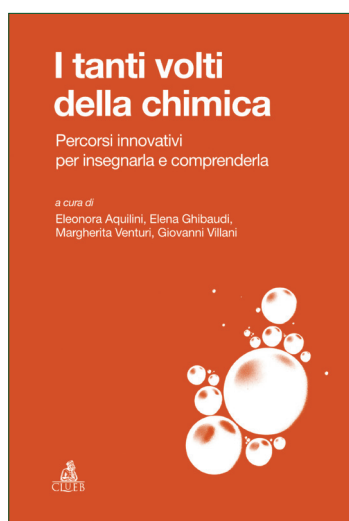
Ulteriori lavori e siti consultati oltre quelli citati

- [1] <https://www.realclimate.org/index.php/archives/2007/06/a-saturated-gassy-argument/>
- [2] <https://www.realclimate.org/index.php/archives/2007/06/a-saturated-gassy-argument-part-ii/>
- [3] <https://www.climalteranti.it/2010/10/31/il-primo-scettico-del-riscaldamento-globale/>
- [4] K. Nakamoto Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Wiley, 2009, p. 58: *Inoltre, sorge una difficoltà pratica nel determinare il numero di fondamentali dallo spettro osservato, poiché le intensità delle bande di overtone e di combinazione sono talvolta paragonabili a quelle delle fondamentali quando appaiono come bande satellite della fondamentale. Ciò è particolarmente vero quando le bande di sovratono e di combinazione sono potenziate in modo anomalo dalla risonanza di Fermi (degenerazione accidentale). Ad esempio, la frequenza del primo sovratono della vibrazione ν_2 della CO_2 (667 cm^{-1}) è molto vicina a quella della vibrazione ν_1 (1337 cm^{-1}). Poiché queste due vibrazioni appartengono alla stessa specie di simmetria..., interagiscono tra loro e danno origine a due forti linee Raman a 1388 e 1286 cm^{-1} . Risonanze di Fermi simili a quella osservata per il CO_2 possono verificarsi per diverse altre molecole.*
- [5] [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Spectroscopy/Vibrational_Spectroscopy/Vibrational_Modes/Combination_Bands_Overtones_and_Fermi_Resonances](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Spectroscopy/Vibrational_Spectroscopy/Vibrational_Modes/Combination_Bands_Overtones_and_Fermi_Resonances)
- [6] <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2023QJRMS.149.1856S/abstract>
- [7] Möller, Detlev. Chemistry of the climate system 2010 Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, Berlin/ New York p. 338 e sgg

I TANTI VOLTI DELLA CHIMICA Percorsi innovativi per insegnarla e comprenderla

a cura di E. Aquilini, E. Ghibaudi, M. Venturi, G. Villani
Clueb (Bologna)

Pag. 382, brossura, 29 euro
ISBN 9788849157970



Oltre quarant'anni fa, nella prefazione di un testo ancor oggi fondamentale per chi si interessa alla didattica della chimica, Leonello Paoloni (L. Paoloni, Nuova didattica della chimica, un progetto culturale per la scuola secondaria, Bari, Bracciodieta Ed., 1981, seconda edizione a cura della Società Chimica Italiana, Roma, 2005, p. 4) rifletteva sul ruolo marginale riservato alla chimica nella scuola secondaria e sulla carente organicità dei contenuti, indicati nei programmi ministeriali. Questo aveva come conseguenza il prevalere dei contenuti tecnici della disciplina su quelli più propriamente culturali che incidono sulla formazione della personalità. Egli attribuiva gran parte della responsabilità ai quadri direttivi della pubblica amministrazione che manifestavano una concreta ignoranza delle problematiche culturali della chimica, ritenuta erroneamente materia professionale dei chimici, ai quali veniva demandata unicamente la definizione tecnica dei contenuti didattici. Nel

porre la richiesta di un peso della cultura chimica adeguato alla sua importanza nella società, Paoloni pensava però che anche la comunità dei chimici dovesse porre attenzione fin dal suo interno ai fondamenti culturali della propria disciplina.

Sulla base di queste ed altre simili riflessioni, nascevano in quegli anni iniziative portate avanti da chi tra i chimici riteneva che fosse giunto anche in Italia il momento di occuparsi di più dell'insegnamento della disciplina, in tutti i suoi aspetti. Nacque quindi la *Chimica nella Scuola (CnS)*, inizialmente bollettino promosso dall'Università di Modena, che successivamente divenne, dal 1983, rivista ufficiale della Divisione di Didattica della SCI, allorché questa celebrò a Firenze il suo terzo Congresso. CnS e Divisione di Didattica Chimica della SCI hanno proseguito lodevolmente la propria opera da allora fino ai nostri giorni, malgrado il sostegno della comunità professionale e della stessa SCI non sia stato sempre adeguato.

La situazione sta fortunatamente cambiando, anche perché a livello di politica universitaria si sono cominciate ad avvertire l'esigenza di prestare attenzione agli aspetti culturali della disciplina, l'importanza di curare i rapporti col cosiddetto "terzo settore", come necessaria premessa per attirare verso i nostri corsi di laurea un maggior numero di studenti, la necessità di dare gli strumenti idonei a coloro che si fanno carico dei corsi universitari di didattica della chimica, entro i percorsi curriculari o nei percorsi di formazione degli insegnanti. In questo senso, il pieno appoggio che la Società Chimica Italiana ha dato per la realizzazione di questo progetto, frutto di una sincera sensibilità per le tematiche culturali di cui l'attuale Presidente ha costantemente dato mostra, fa guardare con maggiore ottimismo al futuro.

Frutto di tale impegno congiunto esce ora questo libro che si propone un duplice scopo: i) offrire supporto ai titolari e ai frequentatori dei corsi di didattica della chimica attivi nei vari percorsi universitari e post-universitari; ii) valorizzare i contributi elaborati dai settori di ricerca didattica, pedagogica, epistemologica e storica applicata alla chimica e alle scienze.

Il testo è articolato in tre sezioni.

La prima affronta aspetti generali della didattica delle scienze: dalle concezioni dell'insegnamento e dell'apprendimento a questioni epistemologiche di base, dalle questioni relative alla trasposizione didattica alle problematiche della valutazione.

La trattazione di aspetti specifici della disciplina chimica che hanno particolare rilevanza didattica è oggetto della sezione centrale del testo. Tra gli altri citiamo il ruolo della storia e dell'epistemologia disciplinari, il significato di didattica laboratoriale in campo chimico, la necessità di affrontare di-

datticamente il rapporto tra disciplina e società. L'ultima sezione del testo ha l'obiettivo di 'incarnare' le considerazioni teoriche presentate nelle prime due sezioni in proposte di percorsi didattici inerenti ai concetti e problemi di natura chimica, pertinenti ai diversi gradi di formazione scolastica e universitaria. Ci sentiamo in conclusione di consigliare la lettura del libro sia a chi è specificamente coinvolto nell'insegnamento della chimica, sia a tutti coloro che sono comunque interessati al suo ruolo nella formazione dei futuri cittadini.

Franco Calascibetta

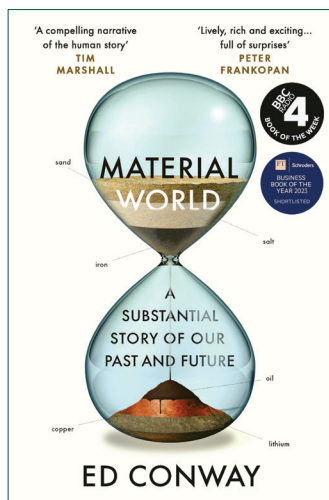
MATERIAL WORLD: A SUBSTANTIAL STORY OF OUR PAST AND FUTURE

di E. Conway

WH Allen

Pag. 512, broccura, 16,50 euro

ISBN 9780753559178



Sabbia - Sale - Ferro - Rame - Petrolio - Litio: Sei varietà di materia che dominano la crescita economica, sociale e materiale della nostra civiltà dai suoi albori ai giorni nostri e che ne determineranno l'immediato futuro. È questa la tesi del volume "Material World: A Substantial Story of Our Past and Future", il cui autore, Ed Conway, è un giorna-

lista economico con notevole competenza scientifica, capacità investigativa e chiarezza di scrittura. Sebbene ampiamente giustificata dall'Autore, la scelta limitata a queste sei materie è ovviamente arbitraria ed il volume è organizzato in sei parti, una per ciascun materiale.

Il testo inizia con il capitolo forse più interessante del libro in cui si affronta la forma di materia a noi più familiare, la sabbia. Dalla sua forma minerale (quarzo, più o meno puro) abbiamo anticamente imparato a ricavare diverse forme di vetro (fino all'ormai indispensabile fibra di vetro o fibra ottica) ma anche per ottenere calcestruzzo (un materiale dall'impronta ambientale enorme), carburo di silicio (ad es. per le auto elettriche Tesla) e silicio cristallino puro o ultrapuro (nella sua forma *solar-grade* per i pannelli fotovoltaici, che i cinesi hanno imparato a fare benissimo, o *semiconductor-grade*, che è ancora monopolio occidentale e coreano). Ove possibile, l'autore ha visitato personalmente le miniere di quarzite più esclusive e segrete così come le fabbriche di semiconduttori più avanzate al mondo come la taiwanese TSMC (ma non la controparte cinese continentale SMIC), oltre a un gran numero di aziende semi-sconosciute specializzate in particolari passaggi della produzione sparse in giro per il mondo.

L'autore ribadisce che pur a fronte di un'enorme disponibilità apparente anche alla sabbia debba essere estesa la definizione di *critical raw material*, un termine che riflette bene il divario tra disponi-

bilità (soprattutto geografica) e attuale richiesta, e che ben si adatta a descrivere la condizione strategica delle tre forme di materia che chiudono il volume (rame, petrolio e litio). Per rafforzare il concetto l'autore afferma che nel solo 2017 (ultimo anno considerato) è stata estratta nel mondo una quantità complessiva di materie prime superiore a quella totale estratta dall'uomo fino al 1950. Per il futuro si intravede una possibile mitigazione del problema (sia in termini quantitativi che ambientali) attraverso il recupero selettivo degli elementi a partire dagli oggetti dismessi, una pratica già in atto soprattutto nel recupero dell'acciaio e di altri metalli strategici.

Ciò che impressiona di questo libro è l'enorme quantità di informazioni e dettagli su aspetti molto poco conosciuti e divulgati dei processi che fanno di questi materiali l'ossatura dell'economia mondiale nelle sue diverse fasi storiche con una particolare attenzione agli aspetti geologici, geochimici, più propriamente chimici (in misura minore rispetto agli altri due), ma anche economici e ambientali dell'estrazione, trasformazione e impiego sia di materie prime molto comuni come sabbia, sale, ferro o idrocarburi, che di forme poco conosciute (come il pet-coke, la poly-halite, il concretene ecc.). Il racconto risulta particolarmente avvincente e si sviluppa come un viaggio storico e geografico attraverso le crescenti necessità materiali dell'umanità e le varie transizioni energetiche che si sono succedute fino a quella attuale (di cui il litio è il materiale feticcio) che vede profilarsi una forte decrescita dell'importanza dei combustibili fossili ma non certamente un suo abbandono più o meno immediato.

Quasi assenti gli errori grossolani: ovviamente un atomo di Si non misura poco più di 0,5 nm (0,543 nm è il parametro di cella cubica) ma poco meno della metà (0,235 nm è la distanza tra due atomi misurata nel silicio cristallino).

Per concludere questa veloce rassegna di un testo dal contenuto quasi enciclopedico vogliamo ricordare che del testo inglese originale (quello da noi consultato, e che suggeriamo) esiste anche la traduzione in italiano dal titolo non completamente aderente di *La materia del mondo: una storia della civiltà in sei elementi* (Marsilio, 2023).

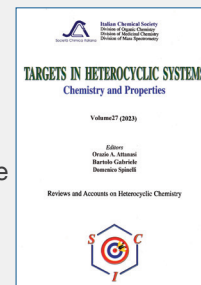
Francesco Neve

LIBRI E RIVISTE SCI

Targets in Heterocyclic Systems Vol. 27

È disponibile il 27° volume della serie "Targets in Heterocyclic Systems", a cura di Orazio A. Attanasi, Bortolo Gabriele e Domenico Spinelli

https://www.soc.chim.it/it/libri_collane/th/s/vol_27_2023



Sono disponibili anche i volumi 1-26 della serie.

I seguenti volumi sono a disposizione dei Soci gratuitamente, è richiesto soltanto un contributo spese di € 10:

- G. Scorrano "La Storia della SCI", Edises, Napoli, 2009 (pp. 195)
- G. Scorrano "Chimica un racconto dai manifesti", Canova Edizioni, Treviso, 2009 (pp. 180)
- AA.VV. CnS "La Storia della Chimica" numero speciale, Edizioni SCI, Roma 2007 (pp. 151)
- AA.VV. "Innovazione chimica per l'applicazione del REACH" Edizioni SCI, Milano, 2009 (pp. 64)

Oltre "La Chimica e l'Industria", organo ufficiale della Società Chimica Italiana, e "CnS - La Chimica nella Scuola", organo ufficiale della Divisione di Didattica della SCI (www.soc.chim.it/riviste/cns/catalogo), rilevante è la pubblicazione, congiuntamente ad altre Società Chimiche Europee, di riviste scientifiche di alto livello internazionale:

- ChemPubSoc Europe Journal
- Chemistry A European Journal
- EURJOC
- EURJIC
- ChemBioChem
- ChemMedChem
- ChemSusChem
- Chemistry Open
- ChemPubSoc Europe Sister Journals
- Chemistry An Asian Journal
- Asian Journal of Organic Chemistry
- Angewandte Chemie
- Analytical & Bioanalytical Chemistry
- PCCP, Physical Chemistry Chemical Physics

Per informazioni e ordini telefonare in sede, 06 8549691/8553968, o inviare un messaggio a segreteria@soc.chim.it

European Chemical Societies Publishing



Chemistry Europe

- 16 chemical societies
- From 15 European countries
- Which co-own 20 scholarly journals
- Over 19 million downloads in 2022
- Over 120,000 articles published since 1995
- With 128 Chemistry Fellows and 8 Honorary Fellows recognized for excellence in chemistry

www.chemistry-europe.org

Analysis & Sensing

Analytical Science Advances 

Batteries & Supercaps

ChemBioChem

ChemCatChem

ChemElectroChem 

ChemistryEurope 

Chemistry - A European Journal

Chemistry - Methods 

ChemistryOpen 

ChemistrySelect

ChemMedChem

ChemPhotoChem

ChemPhysChem

ChemPlusChem

ChemSusChem

ChemSystemsChem

Electrochemical Science Advances 

European Journal of Inorganic Chemistry

European Journal of Organic Chemistry

 Open Access



a cura di Silvia Cauteruccio e Monica Civera

Dipartimento di Chimica

Università di Milano

silvia.cauteruccio@unimi.it

monica.civera@unimi.it

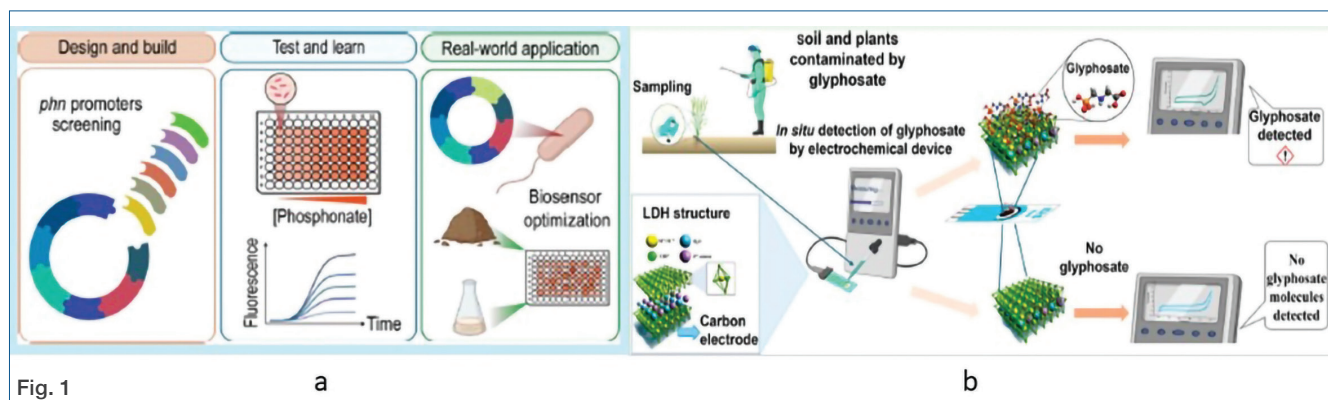
Sensori per la determinazione del glifosato

La *N*-(fosfonometil) glicina, sicuramente più nota come glifosato, è una piccola molecola organica appartenente alla famiglia dei fosfonati sintetici ed è tra i composti più controversi ad oggi utilizzati in ambito agricolo. Il glifosato lo ritroviamo nelle formulazioni di gran parte degli erbicidi impiegati nell'agricoltura intensiva, in quanto permette di ridurre l'impiego di macchine agricole e la lavorazione meccanica in profondità dei terreni adibiti alle coltivazioni per limitare le alterazioni strutturali del suolo. È utilizzato soprattutto per combattere le piante infestanti, in quanto viene assorbito facilmente a livello fogliare e veicolato dal flusso linfatico all'interno della pianta per interferire con i suoi processi vitali senza disperdersi nelle falde acquifere. D'altra parte, tutti questi vantaggi sono stati messi in ombra da numerosi aspetti negativi che si stanno riscontrando nell'uso massiccio di erbicidi a base di glifosato nei confronti di varie forme di vita acquatica, insetti e microrganismi essenziali del suolo con conseguenze dannose anche per il benessere umano.

L'argomento inerente al glifosato è in effetti molto complesso ed in continua evoluzione, soprattutto a livello legislativo, e non sorprende che anche la letteratura proponga continuamente studi riguardanti gli impatti negativi del glifosato sulla salute umana e sull'ambiente, nonché le sfide associate allo sviluppo di tecniche analitiche e strumentali con limiti di rivelabilità sempre più bassi nella determinazione di glifosato in diverse matrici [S. Kumar *et al.*, *Environ. Sci. Adv.*, 2024, **3**, 1030].

A causa della sua elevata solubilità e delle basse quantità solitamente presenti nel suolo e nell'acqua,

la determinazione quali e quantitativa di glifosato in diversi campioni ambientali è un processo tutt'altro che semplice e si avvale principalmente di metodi cromatografici abbinati alla spettrometria di massa, di test immunologici e di biosensori, i quali permettono di raggiungere elevata sensibilità, selettività e rapidità di analisi. Lo sviluppo di biosensori, in particolare, ha mostrato un potenziale enorme nella rilevazione del glifosato, in quanto tecnologie di *bio-sensing* offrono capacità di monitoraggio in tempo reale *in loco* con sensibilità e specificità migliorate, includendo spesso biorecettori o nanomateriali. È stata, ad esempio, riportata per la prima volta una piattaforma di biosensori cellulari basati su fattori di trascrizione in grado di rilevare fosfonati, quali appunto il glifosato [F. Masotti *et al.*, *ACS Synth. Biol.*, 2024, **13**, 3430]. Tali biosensori sono stati messi a punto utilizzando un batterio in grado di degradare il glifosato isolato da terreni contaminati (*Agrobacterium Tumefaciens*, CHLDO) e si confrontano favorevolmente con altre tecniche analitiche, con limiti di rivelabilità compresi tra 0,25 e 50 μM in diversi campioni di suolo e acqua, e possono essere utilizzati anche per altre applicazioni come il rilevamento automatizzato di xenobiotici (Fig. 1a). Valide alternative ai biosensori sono i sensori elettrochimici, nei quali la sensibilità e la selettività dei metodi analitici convenzionali si integrano con la rapidità e la semplicità propria dei metodi elettrochimici. È stato progettato un trasduttore formato da idrossidi doppi stratificati (*Layered Double Hydroxide*, LDH) con Ni e Al aventi difetti superficiali per il rilevamento elettrochimico di glifosato e glufosinato con un limite di rivelabilità fino a 0,081 μM utilizzando la voltammetria a impulsi differenziali [I.





Velázquez-Hernández *et al.*, *ACS Appl. Nano Mater.*, 2024, **7**, 22617]. Le eccellenti prestazioni di rilevamento del sensore sono state attribuite ai difetti superficiali indotti che hanno consentito modifiche nelle proprietà elettriche superficiali degli idrossidi a doppio strato. A completamento di questo studio è stato inoltre proposto un sensore elettrochimico allo stato solido utilizzando elettrodi di carbonio serigrafati disponibili in commercio e membrane di poli(vinil alcol) per potenziali analisi *in loco* (Fig. 1b).

Alphafold3 (AF3)

Con questo nuovo tool i ricercatori di DeepMind compiono un ulteriore passo in avanti nel campo della predizione *in silico* di strutture di biomolecole. Dopo il successo e la rivoluzione iniziata con Alphafold nel 2020, Demis Hassabis e John M. Jumper (vincitori del premio Nobel per la Chimica 2024) hanno applicato la stessa architettura basata sul *deep learning* anche per prevedere con precisione la struttura di complessi contenenti una gamma molto più ampia di biomolecole, tra cui ligandi, ioni, acidi nucleici e residui modificati [J. Abramson *et al.*, *Nature*, 2024, **630**, 493). Inoltre, una delle caratteristiche chiave di AF3 è la sua capacità di prevedere complessi proteina-proteina, compresi quelli che coinvolgono DNA e RNA. Questo rappresenta un grande salto rispetto ad AF2, che si concentrava principalmente sulla previsione delle strutture tridimensionali (3D) delle proteine.

Dal punto di vista dell'architettura le principali modifiche dell'algoritmo riguardano il modulo *evoformer*; infatti, nella nuova versione il sistema riduce il contributo dell'allineamento a sequenza multipla (MSA) sostituendolo con il più semplice modulo *pairformer*. AlphaFold3 elabora l'informazione MSA in modo più semplice per generare una unica *pair representation* del sistema che poi viene passata al modulo che genera la struttura 3D. Questo modulo di predizione della struttura è cambiato rispetto ad AF2, la nuova versione in AF3 utilizza un modulo di diffusione generativa che lavora direttamente sulle coordinate cartesiane degli atomi. L'addestramento della rete avviene aggiungendo del rumore, nella forma di una gaussiana, alle coordinate note in modo che la rete impari a rimuovere

il rumore attraverso un algoritmo di ottimizzazione dell'errore quadratico medio e quindi possa predire le vere coordinate.

Per le interazioni proteina-ligando, gli autori hanno utilizzato il set di benchmark *PoseBusters*, composto da 428 strutture proteina-ligando rilasciate al PDB nel 2021. AF3 supera alcuni classici software di docking nella predizione delle tasche di legame, riuscendo a ottenere risultati accurati anche senza input strutturali, basandosi unicamente sulla sequenza proteica e sulla stringa SMILES del ligando (alcuni esempi sono illustrati in Fig. 2). Anche le modificazioni covalenti (ligandi, siti di glicosilazione) sono accuratamente previste in AF3.

Uno dei principali limiti di AF3 riguarda la gestione della chiralità, poiché il 4% delle strutture generate non sempre la rispetta.

Inoltre, il passaggio ad un tool generativo comporta alcune 'allucinazioni', soprattutto per la predizione di regioni disordinate che vengono erroneamente generate come strutturate. Dal punto di vista conformazionale, le predizioni di AF3 come quelle di AF2, sono limitate dalla 'staticità', ovvero l'impossibilità di cogliere il dinamismo conformazionale. Ad esempio, è noto che le ubiquitina-ligasi E3 adottino una conformazione aperta nella forma apo, ovvero non legata, ed una forma chiusa quando sono legata ai ligandi. Tuttavia, AF3 predice esclusivamente lo stato chiuso della proteina sia per i sistemi legati che per la forma apo.

Rispetto all'articolo pubblicato su *Nature* circa sei mesi fa in cui venivano presentati l'algoritmo e il server per il suo utilizzo, dall'11 novembre gli scienziati hanno la possibilità di scaricare il codice del software e utilizzare AF3 per scopi non commerciali.

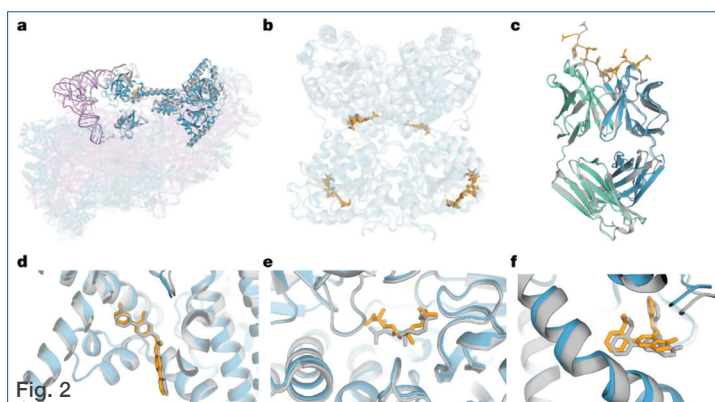


Fig. 2



RIGENCAP: I FILTRI DA CUCINA RIGENERABILI

Il progetto RigenCap propone una cappa innovativa con filtri a carbone attivo rigenerabili in situ tramite fotocatalisi, attivata da luce UV. Questa tecnologia degrada i composti organici volatili (VOC), adsorbiti durante l'aspirazione, nei momenti di inattività della cappa, prolungando la vita dei filtri e riducendo costi, impatti ambientali e durata. Promettente per applicazioni domestiche e industriali, offre una soluzione sostenibile contro l'inquinamento indoor.

Negli ultimi decenni, l'inquinamento indoor è diventato un tema di crescente interesse nel campo della salute pubblica e ambientale. Secondo l'Organizzazione Mondiale della Sanità (OMS), le persone trascorrono circa il 90% del loro tempo in ambienti chiusi, come abitazioni, uffici o scuole, rendendo l'esposizione all'inquinamento indoor un problema cruciale per la salute pubblica. Tra i numerosi contaminanti presenti nell'aria interna, i composti organici volatili (VOC) svolgono un ruolo di primaria importanza a causa della loro diffusione e dei loro effetti negativi sulla salute umana.

I VOC sono emessi da una vasta gamma di materiali e processi, inclusi vernici, prodotti per la pulizia, materiali da costruzione ma anche dalla semplice cottura dei cibi. Durante quest'ultimo processo vengono infatti rilasciate nell'ambiente domestico diverse sostanze chimiche, come particolato, monossido di carbonio (CO), ossidi di azoto (NOx), formaldeide e i già citati VOC. Tra i VOC che si generano durante la cottura, alcune delle sostanze più nocive includono aldeidi, idrocarburi aromatici policiclici (PAH) e altri composti non salutari o comunque di odore sgradevole [1].

Le cappe da cucina rappresentano la principale soluzione contro l'accumulo di questi inquinanti nell'aria domestica, poiché permettono la cattura di una buona parte delle sostanze organiche rilasciate durante la cottura. Esistono due principali tipologie: cappe a espulsione esterna e a ricircolo. Le prime, più efficaci nell'eliminare l'aria inquinata, non sono sempre installabili in appartamenti o edifici con limitazioni strutturali e possono risultare svantaggiose dal punto di vista energetico, eliminando aria già riscaldata o raffrescata. Le cappe a ricircolo, invece, purificano l'aria facendola passare attraverso filtri e reimmettendola nell'ambiente. Tale principio è applicato anche in cucine commerciali, laboratori e sistemi di purificazione di autoveicoli, treni e aerei.

I filtri più utilizzati nelle cappe a ricircolo sono basati su carboni attivi, materiali composti principalmente da carbonio che si

presentano in forma di polvere o pellet di colore nero e sono caratterizzati da una struttura altamente porosa e da un'elevatissima area superficiale, che può raggiungere valori fino a 3000 m²/g. Tale caratteristica li rende eccellenti adsorbenti per una vasta gamma di sostanze chimiche. Tuttavia, la loro efficacia è limitata nel tempo: man mano che il carbone attivo adsorbe i VOC, i suoi pori si saturano riducendone così la capacità di trattenere ulteriori inquinanti. In media, un filtro a carbone attivo può funzionare efficacemente per un periodo che va dai 3 ai 4 mesi, a seconda dell'uso della cappa e della quantità di inquinanti presenti nell'aria della cucina [2]. Dopo questo periodo, il filtro deve essere sostituito, e questo implica non solo un costo economico per l'acquisto di nuovi filtri, ma anche un problema di smaltimento, in quanto i filtri esauriti contengono sostanze tossiche adsorbite durante l'uso e devono quindi essere smaltiti secondo protocolli e norme definiti, per evitare ulteriori impatti ambientali. Il processo di produzione e smaltimento dei filtri a carbone attivo rappresenta una fonte significativa di inquinamento ambientale, soprattutto considerando l'elevato numero di cappe prodotte e vendute ogni anno sia per applicazioni domestiche che ambientali.

In risposta a queste problematiche, la tecnologia delle cappe da cucina sta evolvendo verso soluzioni più sostenibili ed efficienti. Tra le soluzioni più interessanti vi sono cappe che integrano sistemi di rigenerazione dei filtri a carbone attivo, una tecnologia che consente di estendere la vita utile del filtro attraverso procedure di manutenzione periodica. Alcuni produttori propongono sistemi di rigenerazione che prevedono il lavaggio del filtro in lavastoviglie a 60 °C e la successiva asciugatura in forno a 50 °C. Queste operazioni devono essere effettuate ogni 3-4 mesi per mantenere l'efficienza del filtro e la sostituzione deve essere eseguita ogni 3 anni [3]. Un'altra opzione suggerisce la rigenerazione tramite un trattamento termico del filtro in forno a 200 °C per 2 ore. In questi casi, la sostituzione completa del filtro è consigliata solo ogni 10 anni [4].

Tuttavia, sebbene queste soluzioni allungano la vita utile dei filtri, il mercato per tali cappe sembra rimanere limitato. La ragione principale è la complessità delle operazioni di manutenzione, che includono lo smontaggio e il rimontaggio del filtro, non sempre agevoli per l'utente medio. Inoltre, durante i processi di rigenerazione, esiste il rischio che alcuni composti tossici, adsorbiti dal filtro, vengano rilasciati nell'ambiente tal quali. Questi aspetti rappresentano un significativo ostacolo alla diffusione su larga scala di tali tecnologie.

Oltre ai sistemi di rigenerazione dei filtri a carbone attivo, negli ultimi anni sono emersi prototipi di cappe da cucina basate esclusivamente sulla fotocatalisi, che rappresentano, dunque, una potenziale alternativa ai tradizionali filtri a carbone. In questo tipo di cappe la depurazione dell'aria avviene grazie a un materiale fotocatalitico applicato direttamente su una griglia metallica a nido d'ape. La funzione fotocatalitica è attivata dalla luce ultravioletta (UV-C), che, combinata con la superficie del catalizzatore, permette di ossidare i composti organici volatili, semivolatili e gli ossidi di azoto (Fig. 1) [5].

L'ossidazione fotocatalitica rappresenta una tecnologia potenzialmente promettente poiché garantisce un'efficienza costante nel tempo, senza richiedere la sostituzione di filtri o la rigenerazione periodica. Questo sistema impedisce l'accumulo di sostanze tossiche nel filtro, poiché distrugge gli inquinanti invece di immagazzinarli, come avviene nei filtri a carbone attivo. Tuttavia, le cappe fotocatalitiche non sono ancora diffuse sul mercato: mancano dati chiari sull'efficacia in ambienti domestici reali, dove il breve tempo di residenza degli inquinanti potrebbe non permettere una sufficiente interazione con la superficie

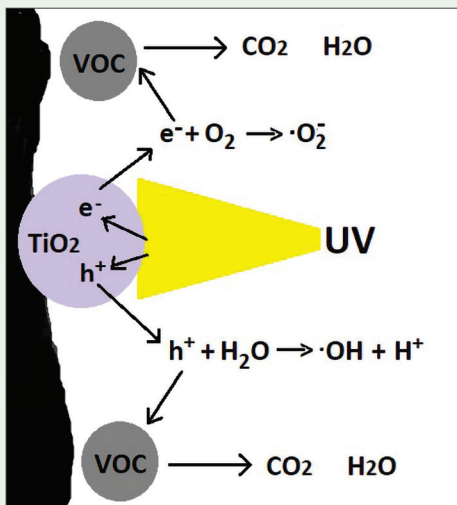


Fig. 1 - Degradazione dei VOC tramite fotocatalisi

catalitica e la luce UV, essenziali per la fotocatalisi.

Una soluzione alternativa è proposta dal progetto RINGENCAP, vincitore del concorso Seed4Innovation, iniziativa per valorizzare idee innovative sviluppate all'Università di Milano, con l'obiettivo di favorire progetti con potenziale di sviluppo industriale o commerciale.

Tale tecnologia, sviluppata dal gruppo di ricerca SUSCHEOPE (<https://sites.unimi.it/pirolacarlo/>) (Fig. 2), si basa su una cappa che utilizza i carboni attivi come componente centrale del processo di rimozione degli inquinanti per adsorbimento, ma introduce un meccanismo

di rigenerazione *in situ* tramite processi fotocatalitici.

La tecnologia prevede la deposizione di un fotocatalizzatore sui carboni attivi commerciali in quantità tale da non compromettere le loro capacità adsorbenti. Ciò consente alla cappa di mantenere un'elevata efficienza di funzionamento nelle normali condizioni di lavoro, come richiesto in applicazioni domestiche e industriali, garantendo al contempo un processo di rigenerazione dopo ogni ciclo di lavoro della cappa.

La rigenerazione *in situ* del carbone attivo viene svolta durante i periodi di inattività della cappa, ad esempio durante la notte o tra un utilizzo e l'altro. Questo processo avviene attraverso una lampada UV a basso consumo energetico, che attiva il fotocatalizzatore depositato sul carbone. Mentre la cappa non è in uso, il sistema fotocatalitico degrada le molecole di sostanze odorose e inquinanti precedentemente adsorbite sui carboni attivi, convertendole in composti innocui come acqua e anidride carbonica.

La rigenerazione può essere svolta nei tempi di inattività della cappa evitando così che i lunghi tempi richiesti delle cinetiche



Fig. 2 - Foto del gruppo di ricerca del dipartimento di Chimica SUSCHEOPE

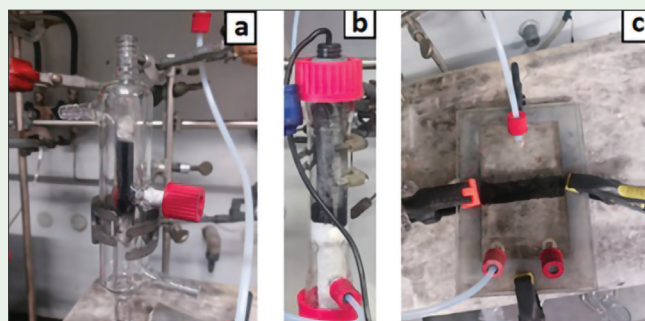


Fig. 3 - Prototipi Ringencap testati: a) a letto fisso di carboni; b) a letto fisso con sezione anulare e lampada interna; c) a letto fisso con ottimizzazione dell'irraggiamento UV per l'applicazione finale

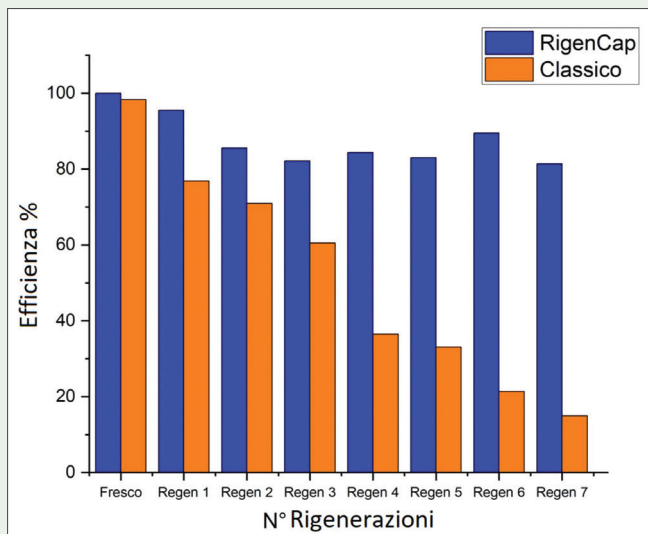


Fig. 4 - Confronto tra l'approccio classico e quello fotocatalitico sull'efficienza dei carboni attivi nel tempo

delle reazioni fotocatalitiche incidano sull'efficienza operativa. Inoltre una programmazione notturna potrebbe ridurre i costi energetici della lampada, comunque limitati essendo questa a bassa potenza di emissione. La tecnologia unisce così l'efficacia dei carboni attivi nell'adsorbimento di VOC e inquinanti con la rigenerazione fotocatalitica *in situ*, eliminando la necessità di sostituzioni periodiche dei filtri. Il risultato è un sistema di purificazione dell'aria più sostenibile, efficiente e a basso impatto energetico, che potrebbe rappresentare una potenziale alternativa nel settore delle cappe da cucina e della purificazione dell'aria in generale.

La versatilità di questa tecnologia la rende particolarmente adatta a una vasta gamma di applicazioni in cui è essenziale mantenere elevati standard di purificazione dell'aria. Ciò include non solo ambienti domestici, ma anche contesti industriali e di ricerca, dove il controllo degli inquinanti atmosferici è cruciale per garantire la sicurezza e l'efficienza dei processi produttivi. Presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano sono stati condotti esperimenti per valutare l'efficienza di adsorbimento dei composti organici volatili (VOC) e la sua evoluzione nel tempo. I dati sono stati ottenuti facendo passare aria arricchita con metiletilchetone (MEK), utilizzato

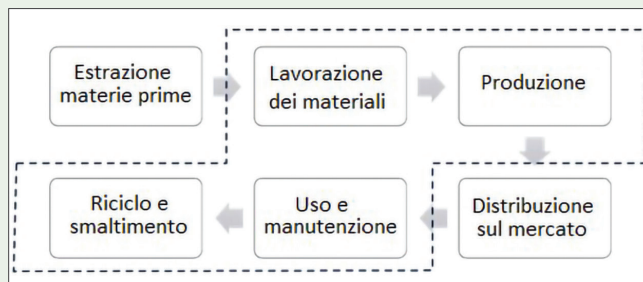


Fig. 5 - Confini di sistema dello studio LCA

come VOC di riferimento in conformità alle normative vigenti (CEI EN 61591), attraverso un letto di carbone attivo. Il flusso d'aria in uscita è stato analizzato in continuo per determinare la quantità di MEK adsorbito, fino al raggiungimento della saturazione del carbone attivo. Sono stati testati diversi prototipi di reattore (Fig. 3), al fine di riprodurre il più fedelmente possibile le condizioni operative reali di una cappa da cucina.

Al termine di ogni ciclo di adsorbimento, a carbone attivo esaurito, è stata eseguita la rigenerazione mediante l'uso di una lampada UV. Dopo la rigenerazione, il test di adsorbimento è stato ripetuto per verificare nuovamente l'efficienza del sistema.

Un'analisi comparativa tra l'approccio tradizionale, basato su filtri a carbone attivo classico e quello fotocatalitico, sviluppato nel progetto RIGENCAP, ha evidenziato notevoli vantaggi a favore di quest'ultimo. In particolare, il sistema fotocatalitico consente di mantenere un'elevata efficienza di abbattimento degli inquinanti per periodi molto più lunghi rispetto ai filtri tradizionali (Fig. 4).

Inoltre, l'aspetto ambientale della tecnologia è stato valutato mediante analisi del ciclo di vita (LCA, Life Cycle Asses-

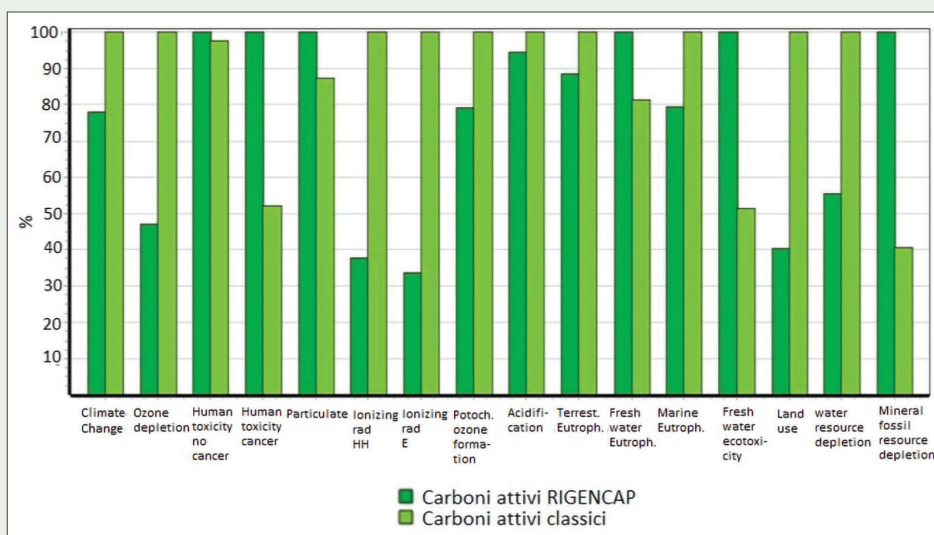


Fig. 6 - Confronto delle diverse categorie d'impatto considerate nello studio LCA tra carboni attivi classici (verde chiaro) e carboni attivi RIGENCAP (verde scuro)

sment). In particolare, abbiamo confrontato la produzione di carboni attivi tradizionali e carboni attivi fotocatalitici, tenendo conto di tutti i processi coinvolti, dalla lavorazione iniziale dei materiali fino al riciclaggio e allo smaltimento finali (Fig. 5).

Poiché l'obiettivo dell'analisi LCA era confrontare i carboni attivi comuni con quelli fotocatalitici, che differiscono per durata e altre caratteristiche, si è scelto di utilizzare come unità funzionale un metro cubo di aria satura di MEK (composto organico volatile di riferimento) a 0 °C. Successivamente, è stata calcolata la quantità di carbonio necessaria per rimuovere il MEK contenuto in quest'unità, normalizzando i risultati rispetto alla capacità complessiva di purificare l'aria.

L'analisi è stata realizzata con il software SimaPro 9.5.0, utilizzando i dati del database Ecoinvent 3 - Cut Off. Per valutare l'impronta di carbonio del sistema, è stato applicato il metodo IPCC 2013 GWP 20°. L'impronta idrica è stata valutata tramite il metodo AWARE, mentre per parametri come la tossicità umana e l'ecotossicità si è impiegato il metodo ILCD 2011 Midpoint+.

I principali risultati dello studio comparativo sono presentati in Fig. 6. Come si può osservare, il sistema fotocatalitico basato sulla tecnologia RIGENCAP si dimostra migliore rispetto ai carboni attivi tradizionali in molte delle categorie d'impatto analizzate. Di conseguenza, questa tecnologia può essere con-

siderata una valida alternativa ai carboni attivi convenzionali attualmente utilizzati nelle cappe di filtrazione dell'aria.

In conclusione, il progetto RIGENCAP rappresenta quindi un'interessante e potenziale alternativa sostenibile nelle tecnologie per la purificazione dell'aria. I risultati ottenuti per ora in scala di laboratorio possono essere una base concreta per il passaggio di scala di questa tecnologia dalle molteplici applicazioni per il trattamento dell'aria domestica, di laboratori o di processi industriali.

BIBLIOGRAFIA

- [1] S.K. Brown, M.R. Sim *et al.*, *Indoor Air*, 1994, **4**, 123.
- [2] 1 ottobre 2024. [Online]. Available: <https://www.faberspa.com/blogs/it/filtro-a-carboni-attivi-della-cappa-filtrante-pulizia-e-manutenzione>.
- [3] [Online]. Available: <https://www.faberspa.com/blogs/it/filtro-a-carboni-e-cappa-aspirante-da-cucina-caratteristiche-pulizia-e-manutenzioni> accessed: 25/09/2024 [accessed 1 ottobre 2024].
- [4] [Online]. Available: <https://www.neff-home.com/it/the-ingredient/tips-tricks/come-funziona-filtro-carboni-attivi> [accessed 1 ottobre 2024].
- [5] S. Kim, S. Kim, S. Lee, *Chempluschem*, 2022, **87**(1), e202100486.



**NUOVA
ENERGIA PER LA
TUA AZIENDA**

AGICOM S.r.l.

CONCESSIONARIA DI PUBBLICITÀ PER QUESTA RIVISTA
www.agicom.it

Chimica ELEMENTI DI FUTURO



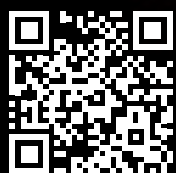
Società
Chimica
Italiana

XXVIII Congresso Nazionale
MILAN, 26 - 30 Agosto 2024

SIAMO LA SCIENZA DEL CAMBIAMENTO

Unisciti alla Società Chimica Italiana e contribuisci alla trasformazione scientifica che sta plasmando il futuro e affrontando le sfide globali del nostro tempo. Avrai accesso a risorse esclusive, opportunità di formazione e connessioni con professionisti e ricercatori impegnati per un mondo più sostenibile e innovativo. Insieme, possiamo guidare il cambiamento e ispirare il futuro attraverso la chimica.

SCOPRI DI PIÙ



DIVENTA PARTE
DEL FUTURO.
UNISCITI ALLA



Società
Chimica
Italiana