



**Dipartimento di
Scienze Chimiche e Ambientali**

2004-2006

Tre anni di Attività



L'edificio di via Valleggio 11 in Como,
Sede dell'Amministrazione del Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali.

Questo opuscolo è stato allestito da Norberto Masciocchi ed Elisabetta Zanardini
del Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali nel mese di Maggio 2006.

Presentazione

Al termine del 2006 si concluderà il primo triennio di attività del Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali (DSCA) dell'Università degli Studi dell'Insubria, istituito ed attivato nel gennaio 2004 per iniziativa di un consistente gruppo di Docenti della Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali di Como.

La presente pubblicazione si prefigge lo scopo di documentare le molteplici attività scientifiche, didattiche e di trasferimento culturale e tecnologico curate dai Ricercatori del DSCA in questi tre anni.

A tale riguardo, abbiamo inteso descrivere la ricca attività di ricerca svolta nel DSCA, corredandola con brevi resoconti scientifici e con l'elenco completo delle pubblicazioni del biennio 2004-2005.

Tale iniziativa editoriale verrà seguita a breve (settembre 2006) da una *Giornata Scientifica Dipartimentale*, aperta a Studenti, Ricercatori ed Operatori di Enti Pubblici e Privati, confidando che quanti vorranno partecipare a quest'evento possano acquisire informazioni utili per un proficuo scambio di competenze unitamente a motivi di avanzamento culturale e sociale.

Dal punto di vista scientifico, il DSCA si è caratterizzato per la presenza, al suo interno, di Gruppi di Ricerca omogenei che fanno riferimento all'Area Ambientale (Geologia, Botanica, Ecologia, Igiene Industriale e Microbiologia) e Chimica (Inorganica, Organica, Fisica ed Analitica). Questa suddivisione formale trova riscontro nelle diverse attività didattiche dei Docenti che costituiscono il nucleo di diversi Corsi di Laurea di primo e secondo Livello attualmente attivi presso la Facoltà di Scienze di Como.

Ovviamente, sia a livello didattico che a livello scientifico, esiste una mutua permeabilità e continua osmosi di interessi che rendono i progetti scientifici e didattici presenti nel DSCA particolarmente interessanti e caratterizzati, assai spesso, da elevata interdisciplinarietà.

L'attività di ricerca in ambito universitario viene valutata (anche) dalla quantità e qualità delle pubblicazioni scientifiche. Recenti ricognizioni (CIVR - Comitato di Indirizzo per la Valutazione della Ricerca, ISI - Institute for Scientific Information) hanno individuato, per quanto riguarda il Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali, un congruo numero di pubblicazioni (superiore alle 50 unità per anno) di livello internazionale soggette a "peer review" (con referee anonimi). A queste si affiancano le presentazioni delle ricerche tenute nell'ambito di Congressi Nazionali ed Internazionali, Atti degli stessi o semplicemente presentazioni o seminari su invito presso prestigiosi Istituti di Ricerca Nazionali e Stranieri. Diversi Docenti del DSCA sono inoltre impegnati nell'organizzazione di manifestazioni scientifiche (Workshops, Seminari, Congressi Nazionali ed Internazionali, Scuole di Dottorato) che affiancano la normale attività di ricerca, oltre che in Progetti di Ricerca Ministeriali ed Europei. Alcuni Docenti sono inoltre redattori di Libri, Capitoli di Libri o Collane specifiche, nonché *Editors* di Periodici Internazionali di carattere scientifico.

Oltre ai laureandi delle diverse discipline che partecipano a progetti di ricerca di Docenti del Dipartimento, merita di essere sottolineata la presenza continuativa di più di 40 laureati che, a vario titolo (borsisti, assegnisti, dottorandi, ospiti stranieri e collaboratori scientifici), frequentano annualmente la struttura dipartimentale.

Il DSCA rappresenta la sede istituzionale per la ricerca scientifica delle Aree Chimica ed Ambientale, e gestisce il patrimonio e le risorse assegnate ai

diversi gruppi di ricerca sotto forma di finanziamenti di Ateneo, Nazionali o di Progetti Europei a rete. Di particolare rilievo sono state inoltre le collaborazioni con Industrie ed Aziende del Territorio, sotto forma di contratti *ad hoc*, o di scambi di competenze con Enti di Ricerca Pubblici e Privati (Stazione Sperimentale per la Seta, ASL, CNR, Musei) per lo sviluppo di programmi di ricerca di interesse comune. Significativamente, le diverse attività di ricerca, sia di carattere sperimentale che teorico, si sono sviluppate totalmente nella sede comasca (con le ovvie eccezioni delle collaborazioni istituzionali e delle uscite ‘sul campo’ dei Docenti di Area Ambientale).

Il DSCA, in consorzio con la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Como, ha operato per l’attivazione del *Centro Grandi Attrezzature per lo Studio e la Caratterizzazione della Materia*, presso cui sono allocati strumenti scientifici di considerevole valore che permettono studi avanzati nel campo dell’Ottica, della Spettroscopia, dell’Analisi Chimica e della Diffrattometria, e che sono a disposizione, con le opportune modalità di accesso, anche di soggetti esterni all’Ateneo.

Auspichiamo che questa iniziativa editoriale possa stimolare interesse e “curiosità” presso Operatori Culturali, Scientifici, Economici del Tessuto Produttivo dell’Alta Lombardia, cui di buon grado rivolgiamo l’invito a contattarci direttamente per qualsivoglia approfondimento.

Prof. Norberto Masciocchi, Area Chimica
Prof.ssa Elisabetta Zanardini, Area Ambientale

A) ATTIVITA' SCIENTIFICHE

Area Ambientale: Le ricerche svolte nell'ambito dell'Area Ambientale con sede a Como riguardano prevalentemente i settori geologico, biologico, ecologico e di igiene dell'ambiente e comprendono sia studi di base sia studi applicativi condotti direttamente sul territorio. Tali attività rafforzano il contesto scientifico e culturale adatto al raggiungimento degli obiettivi individuati nell'ambito dei Corsi di Laurea in Scienze Ambientali di Como.

I Ricercatori dell'Area Ambientale, assieme al personale tecnico e di borsisti, assegnisti e dottorandi, hanno condotto nel corso di questi anni, ricerche di notevole rilievo sia in campo nazionale che internazionale. Vanno menzionati programmi interdisciplinari di ricerca paleolimnologica ed ambientale sul bacino del Lario (finanziamenti CARIPLO, INRM, APAT), che hanno permesso il primo rilievo morfobatimetrico *multibeam* ad alta risoluzione in un grande bacino lacustre in Italia, e uno fra i primi in Europa. A tali ricerche si affiancano progetti finanziati dall'Unione Europea quali il progetto sullo “studio dell'interazione della vegetazione con il suolo con finalità di protezione contro l'erosione”. Se si considerano i ricorrenti eventi di erosione degli ultimi anni a causa dei cambiamenti climatici, tali ricerche appaiono rilevanti nel contesto territoriale dell'Ateneo e rappresentano il diretto collegamento della ricerca universitaria alle esigenze del territorio.

Numerose e di notevole interesse risultano anche le collaborazioni di ricerca con istituzioni nazionali (INRM, INGV, APAT, Università di Milano, Università di Padova, CNR-IRSA, CNR-ISE Pallanza) ed internazionali (quali ETH Zurigo, Università di Paris VII e dell'Arkansas, INQUA).

Oltre alle collaborazioni esterne, si sono anche create strette interazioni con gruppi di ricerca di diverse discipline scientifiche con interesse comune alla

ricerca in campo ambientale e naturalistico; uno dei progetti di ricerca di eccellenza, recentemente finanziati dall'Ateneo, nasce infatti dall'efficace collaborazione tra i docenti e ricercatori dei settori della fisica nucleare, chimica analitica e geologia ambientale.

Nell'ambito delle iniziative territoriali va anche menzionato il Centro Internazionale per la Ricerca Limnologica (CIRLIM), che, con la collaborazione della Comunità Montana Alto Lario Occidentale, ha permesso l'installazione di una stazione di studio per l'ambiente lacustre a Palazzo Gallio, Gravedona. Tale stazione ha la funzione di riferimento logistico ed operativo per gli studi ambientali nel settore settentrionale del Lago di Como permettendo in tal modo attività di ricerca di notevole impatto territoriale.

Infine, ma non meno importanti, vanno menzionate le numerose collaborazioni di ricerca tra l'Università, che fornisce competenze, con Aziende Pubbliche e Private, che, unitamente ad enti ed istituzioni, forniscono esperienza imprenditoriale e di management.

Area Chimica: L'attività di ricerca di Area Chimica svolta nella Sede di Como è affidata a circa venti Ricercatori, e ai loro giovani collaboratori (laureati frequentatori, dottorandi, contrattisti ed assegnisti). Va segnalato, a questo riguardo, il contributo di personale tecnico qualificato che affianca in modo sostanziale le diverse attività, sotto forma di allestimento e gestione dei laboratori, e funzionamento e manutenzione della strumentazione scientifica. Includendo i laureandi dei Corsi di Laurea (triennali e specialistici) a carattere chimico, sono più di 60 le persone che, a vario titolo ed annualmente, svolgono attività continuata di ricerca chimica presso il DSCA. Tali attività si caratterizzano per la loro versatilità, spaziando da

studi di ricerca di base e/o metodologici, a campi applicativi quali le scienze farmaceutiche, dei materiali e di risoluzione di problematiche ambientali.

Formalmente, quattro sono le Unità Operative presenti nel DSCA: Chimica Analitica, Chimica Inorganica, Chimica Fisica e Chimica Organica. In maniera non sporadica queste Unità interagiscono tra loro in occasione di progetti che prevedono interdisciplinarietà, e, spesso, con unità Operative di area non chimica del nostro e di altri Atenei. Questo coinvolgimento trasversale, infatti, è testimoniato dalla presenza di progetti comuni tra le Aree Inorganica ed Organica, tra le Aree Chimico-Fisica ed i Fisici della sede Comasca e tra l'Area Analitica ed i Ricercatori Ambientali comaschi. Sono inoltre attivi numerosi rapporti di ricerca con Enti Pubblici e Privati di carattere nazionale (Università, CNR, ARPA, etc.) ed internazionale (Università, CNRD, CSIC, Consorzi, Azioni Integrate, Progetti UE, etc.), anche con Ricercatori non Chimici (Geologi, Biologi, Ecologi, Fisici e, recentemente, Specialisti in Conservazione e Restauro di Beni Artistici).

La versatilità degli interessi dei Ricercatori di Area Chimica, che coprono una vasta area del panorama scientifico internazionale, testimonia del fatto che l'attività di ricerca dei Ricercatori Chimici del DSCA si è inserita nelle tematiche più all'avanguardia a livello internazionale, come confermato dalla presenza di molti Docenti Chimici in Organismi Scientifici e in Comitati Organizzatori di numerose manifestazioni scientifiche internazionali.

B) RAPPORTI CON IL TERRITORIO

L'Area Ambientale del DSCA, interagendo con numerosi Enti Territoriali (quali le Comunità Montane, Fondazione Provinciale Comasca, Amministrazioni Comunali e Provinciali, ANPA) ed Istituzioni del mondo produttivo (Camera di Commercio, Unione Industriali) si propone quale obiettivo primario quello di individuare le problematiche territoriali di maggior interesse e di condurre ricerche scientifiche che siano in grado di dare adeguate risposte.

Obiettivi prioritari sono: *i)* operare per lo sviluppo di una cultura ambientale e per la gestione, anche economica, delle interazioni dei diversi fattori, fisici, chimici, biologici e culturali, indispensabili per esprimere la realtà dinamica dell'ambiente; *ii)* fornire un supporto concreto ed operativo ai processi decisionali, agli interventi di protezione civile, all'allestimento ed all'impiego di tecnologie di controllo e monitoraggio ambientale, all'attivazione di processi volontari per il miglioramento delle performances ambientali d'impresa (EMAS, ISO 14000), all'auditing e alla certificazione delle stesse performance, nonché alle valutazioni dell'impatto ambientale, al reporting interno, al controllo integrato dell'inquinamento, al concorso nelle valutazioni economico-patrimoniali; *iii)* garantire la formazione della figura professionale di comunicatore ambientale dotato di una elevata cultura scientifica in campo naturalistico-ecologico, e di un'adeguata conoscenza dei mezzi di comunicazione di massa (televisione, giornale, radio, riviste, libri, Internet), capace quindi di tradurre i concetti scientifici legati alla protezione, tutela e divulgazione ambientali destinandoli ad un pubblico più vasto possibile. E' al fine di risolvere tali esigenze che da tempo sono stati avviati stretti rapporti di collaborazione con il Territorio lombardo, a livello

di Aziende, Enti locali pubblici e privati. Tali interazioni “*territorio – studenti – docenti*” hanno portato ad iniziative di notevole interesse quali:

- L’organizzazione di seminari e conferenze aperti al pubblico, tenuti sia da docenti universitari che da esperti italiani e stranieri, nell’ambito di problematiche ambientali più attuali, con particolare attenzione a quelle che pongono gli studenti a contatto diretto con il mondo del lavoro;
- La costante programmazione di stage didattici multidisciplinari che permettono agli studenti la diretta applicazione in campo delle conoscenze acquisite a lezione;
- La possibilità per gli studenti delle Lauree triennale e specialistica di svolgere tirocinii e/o tesi di laurea presso Enti di Ricerca pubblici e privati che operano nel settore del controllo, della protezione e del recupero dell’ambiente e del territorio.

Analogamente, il Manifesto degli Studi di questo Ateneo prevede, per i laureandi in Chimica e Chimica Industriale, un contatto diretto con la realtà di laboratorio per un breve progetto applicativo, spesso in collaborazione con Industrie ed Aziende del Territorio Comasco. Questo tirocinio sperimentale, altamente professionalizzante, permette lo sviluppo di una ricerca autoconsistente e l’apprendimento di tecniche industriali non facilmente reperibili in ambito accademico.

Inoltre, i proficui contatti con il Territorio sono ulteriormente rafforzati da progetti comuni tra Ateneo ed Istituti di Insegnamento Medi Superiori, tramite attuazione di percorsi didattici sperimentali, seminari e lezioni nelle Scuole, attività di orientamento e visite guidate presso realtà industriali. L’interazione continua e coordinata tra docenti dell’Ateneo e docenti e studenti di Istituti Tecnici Superiori ha permesso di diffondere la conoscenza

di nuove metodologie presso le Scuole, e di creare di nuovi sbocchi occupazionali presso le piccole e medie industrie (PMI), di cui è ricco il Territorio dell'Alta Lombardia. Pertanto, la diffusione e comprensione delle nuove tecniche, illustrate e favorite dall'Ateneo, costituiscono un punto di partenza per una capillare distribuzione delle risorse (tecniche, economiche, umane e culturali) anche in ambito industriale.

I rapporti di tipo scientifico, tecnologico e formativo con le PMI, già da tempo in atto tramite collaborazioni occasionali e interazioni bidirezionali, sono stati recentemente rinvigoriti, grazie alla istituzione di un *Centro di Servizi di Ateneo per lo Studio e la Caratterizzazione della Materia*, che prevede attività di gestione e manutenzione di un parco macchine di alta tecnologia di proprietà dell'Ateneo, e attività di formazione continua nei confronti di utenti esterni. A tal fine, il Centro di Servizi sopra citato, e le attività di Formazione recentemente istituite (quali, per esempio, il Master Professionalizzante in Scienza e Tecnologia del Colore, aperto a operatori tecnologici, professionisti, restauratori ed artisti) intendono valorizzare il ruolo propositivo dell'Università dell'Insubria nell'allestimento di interazioni dirette e proficue con le realtà locali.

Da ultimo, lo sviluppo di progetti di ricerca *applicata* da parte dell'Ateneo ha trovato ulteriori stimoli da collaborazioni con Enti esterni, che hanno individuato, a loro volta, la natura e la consistenza degli interventi, scientifici, tecnologici e ambientali necessari, mettendo a disposizione risorse economiche e strumentali, oltre che personale qualificato. Tali attività di ricerca hanno portato alla pubblicazione di articoli scientifici ed al deposito di alcuni brevetti, in stretta collaborazione con Aziende Private, a tetimonianza dell'importanza dei risultati congiuntamente conseguiti e della ricaduta innovativa degli stessi.

C) ATTIVITA' DI SUPPORTO ALLA DIDATTICA

Il DSCA costituisce il centro principale per la ricerca chimica ed ambientale del Polo Scientifico di Como. In tale ambito si inseriscono tesisti, tirocinanti, laureandi di II livello e dottorandi che operando scientificamente, entrano a pieno titolo nell'organico dei Gruppi di Ricerca pertinenti, e, in qualche caso, anche destinatari di fondi speciali ministeriali o europei per "giovani in formazione". Al fine di divulgare le conoscenze e i risultati ottenuti nell'ambito dei vari progetti scientifici di Ateneo, Nazionali ed Europei, ai quali partecipano i Docenti del DSCA, alle attività didattiche tradizionali (seminari e lezioni per dottorandi), vengono affiancati Workshops e Giornate di Studio su tematiche di particolare interesse.

La presenza ed operatività dei tecnici di area chimica, informatica ed ambientale che gestiscono i diversi laboratori delle sedi di via Castelnuovo e di via Lucini, presso cui sono allocati spazi didattici, aule informatiche e strumentazione di alto valore e qualità (NMR, CHN, diffrattometri, cromatografi, spettrometri, etc.), permettono di fornire un adeguato supporto alle attività didattiche. Va sottolineato che il Dipartimento partecipa attivamente ai costi di funzionamento di questi laboratori e per la strumentazione (gas tecnici, reagenti e solventi, manutenzione, assicurazioni, etc.) in cogestione con la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Como ed il Centro Grandi Attrezzature.

Infine risultano numerosi i progetti di Ateneo e Regionali di Orientamento indirizzati agli studenti di Istituti Scolastici di Istruzione Superiore, per i quali il DSCA ha messo a disposizione Docenti e Strutture, favorendo incontri tematici, sia presso le sedi scolastiche che presso i propri laboratori, in vista delle scelte post-maturità.

Tematiche di Ricerca di Area Chimica

- Studi strutturali, spettroscopici e termocinetici di composti molecolari e polimeri di coordinazione con proprietà funzionali. Correlazioni struttura-proprietà.
- Sintesi, caratterizzazione spettroscopica, reattività stechiometrica e catalitica di composti di coordinazione ed organometallici.
- Sintesi di molecole organiche a struttura eterociclica azotata di interesse biologico, farmacologico e diagnostico.
- Applicazione di composti organometallici e complessi di metalli di transizione nella sintesi organica stereoselettiva.
- Sviluppo di metodiche strumentali per l'analisi in traccia ed ultratraccia in campo ambientale e dei beni culturali.
- Caratterizzazione analitica e chemiometrica di materiali solidi (catalizzatori, materiali lapidei, particolato, sedimenti)
- Metodi Monte Carlo quantistici: sviluppi ed applicazioni.

Tematiche di Ricerca di Area Ambientale

- Botanica ambientale e applicata alla caratterizzazione del territorio e prevenzione del rischio.
- Geodinamica di zone orogeniche.
- Analisi e valutazione dei rischi naturali in relazione a fenomeni sismici, vulcanici e geologico-idraulici.
- Limnologia e paleolimnologia applicate ai laghi di tipo alpino.
- Igiene industriale: dalla prevenzione ambientale alla tutela della salute.
- Studio della distribuzione dei contaminanti nell'ambiente e dei loro effetti sugli ecosistemi - Studio degli ecosistemi acquatici.
- Biotecnologie microbiche applicate all'ambiente - Diversità microbica ed ecologia molecolare in ecosistemi naturali e artificiali.

Studi Strutturali di Polimeri di Coordinazione con Proprietà Funzionali

Norberto Masciocchi, Simona Galli

Negli ultimi anni si è dimostrato che gli ioni di metalli di transizione, accoppiati ad opportuni leganti organici, sono estremamente importanti nei processi di autoassemblaggio che portano alla formazione di polimeri di coordinazione. Molte di queste specie sono state caratterizzate mediante metodi ab-initio di diffrazione da polveri, tecnica sviluppata in ambito metallorganico (anche) da questo Gruppo. La varietà dei composti caratterizzati comprende materiali microporosi capaci di gas-sensing, magneti molecolari, specie elettroluminescenti, composti di inclusione e perfino farmaci.

In the last years it has been widely demonstrated that transition metal ions, coupled to suitable organic ligands, are extremely important in the self-assembly processes (in solution or as sols/gels – chimie douce), leading to nanometric discrete species or coordination polymers. Simultaneously, a renewed interest has been raised toward polymeric materials (organic-inorganic hybrids) possessing a variety of functional characteristics, such as: plastic, (di)electric, magnetic, optical, catalytic, sorption and molecular recognition properties. For example, three-dimensional coordination polymers with permanent porosity allow the storage of gaseous species such as H₂ (see Fig. 1); organic zircono-phosphonates are employed as proton conducting membranes in fuel cells; simple linear coordination polymers, thanks to spin-crossover phenomena around 300 K, can be used as T and P sensors and even as active-matrix displays; polysubstituted metal pyrazolates are employed as phosphorescent materials for RGB screens; nanoporous 2- or 3-dimensional species with controlled-size cavities have been shown to be efficient heterogeneous catalysts capable of stereo- and enantio-selectivity; acentric solids containing highly polarisable heteroaromatic chromophores may be employed in the field of second order non-linear optics.

The polymeric nature of many of these species is a guarantee of (among other properties) a relevant thermal stability and a higher resistance to oxidation or to exposure to solvents. The relevance, the industrial interest as well as the likely economical and occupational consequences of these investigations are witnessed by the many international patents, pending or deposited also by non academic research centres.

Accordingly, in the last years we have developed a project (in collaboration with a number of national and foreign research institutes, as well as with

private companies) on the synthesis, spectroscopic, thermal and structural characterization of functional materials which cannot be studied by conventional single-crystal diffraction methods. Polymeric complexes, twinned and metastable phases or powders generated *in situ* by thermal treatments, typically affording polycrystalline materials only, have been structurally characterized by powder diffraction methods. This technique, developed in the last years in the field of coordination compounds (also) by our Group, has allowed the characterization of, up to now, *more than one-hundred* polycrystalline species (metal-organic frameworks, drugs, inclusion compounds, organometallic species or catalysts, *etc.*).

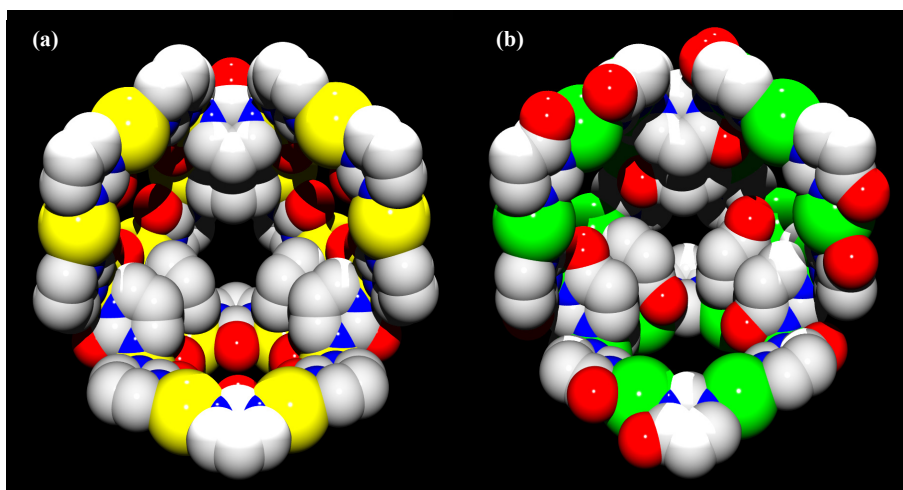


Figure 1. View of the interior of the β -cages in the microporous metal-organic frameworks of (a) $[\text{Pd}(2\text{-pymo})_2]_n$ and (b) $[\text{Cu}(4\text{-pymo})_2]_n$, capable of storing large quantities of H_2 gas.

Highlights

The expertise of this Group in the structural characterization of polycrystalline materials by *ab-initio* X-ray powder diffraction methods has been widely recognized. Recent examples include: molecular magnets, drugs (Acitretin[®]) [1], microporous materials [2], inclusion compounds, electroluminescent complexes (Alq_3) [3].

Relevant Publications

- [1] L.Malpezzi, G.A.Magnone, N.Masciocchi, A.Sironi, *J.Pharm.Sci.*, **2005**, 1067.
- [2] E.Barea, J.A.R.Navarro, J.M.Salas, N.Masciocchi, S.Galli, A.Sironi, *J.Am.Chem.Soc.*, **2004**, *126*, 3014; A.Cingolani, S.Galli, L.Pandolfo, C.Pettinari, N.Masciocchi, A.Sironi, *J.Am.Chem.Soc.*, **2005**, *127*, 6144.
- [3] M.Muccini, M.A.Loi, K.Keveney, R.Zamboni, N.Masciocchi, A.Sironi, *Adv.Mater.*, **2004**, *16*, 861.

Chimica di Coordinazione: Catalisi omogenea, eterogenea e bio-inspired

G. Attilio Ardizzoia, Stefano Brenna, Girolamo La Monica, Angelo Maspero

L'importanza della chimica di coordinazione è ampiamente documentata dal vasto utilizzo di sistemi metallici in molteplici aree di ricerca. Dalla catalisi (omogenea ed eterogenea), alla sintesi di nuovi materiali funzionali (ad esempio per applicazioni nel campo dei sensori, dell'ottica non lineare, dei magneti molecolari), fino al recente interesse per la 'bio-inspired catalysis', dove complessi metallici opportunamente progettati simulano l'operato di metallo-enzimi e metallo-proteine la cui attività catalitica è ben nota. L'interesse del nostro gruppo di ricerca è volto principalmente alla sintesi e alla caratterizzazione di nuovi complessi nei quali il centro metallico, opportunamente attivato mediante leganti appositamente progettati e sintetizzati, ricopre un ruolo attivo nella catalisi omogenea e supportata.

The synthesis of new metallic systems, where the metal centres are forced in a desired geometry by the presence of particular ligands, is doubtless one of the main goal of coordination chemistry. These systems, thanks to the optimization of the steric and electronic properties, show an enhanced catalytic activity and frequently exhibit atypical and remarkable chemical-physic properties.

The interest of this research group is mainly focussed on homogeneous catalytic reactions bringing to the formation of new C-C bonds. In the specific, using functionalized nitrogen ligands (particularly pyrazoles, imidazoles, triazoles, or imines and oximes) we synthesized new compounds whose coordination chemistry and catalytic activity was deeply investigated. Relevant results were obtained in alkynes oligomerization mediated by rhodium(I) and molybdenum(0) centres, obtaining a variety of substituted benzenes. High consideration received the rhodium(I) dimeric species of formula $[\text{Rh}(\text{pz})(\text{ethylene})_2]_2$ (Hpz: a generic pyrazole), which showed a turnover frequency similar to the catalyst used in industrial processes in the polymerization of acetylene. A parallel study was conducted on different copper(I) species, in the metal-mediated decomposition of diazoacetates in the presence of olefins. High diastereoselectivities were achieved in these cyclopropanation reactions, where different polynuclear systems of the type $[\text{Cu}(\text{pz})]_n$ were involved.

A further investigation is devoted to the synthesis of new ligands drawing inspiration from Nature, thinking about the enzymatic systems which have been developed by living organisms during life evolution. The introduction

of suitable substituents on the organic moieties can permit a careful systematic modification of the ligands and a fine tuning of the steric and electronic effects around the metal centers. The effect of such variations on the reactivity is then examined in detail in order to identify those factors contributing to enhancing the activity and selectivity of the catalytic systems. In addition, recently we also directed our attention onto supported catalysis, where the active metal centers are anchored on a insoluble inorganic or organic matrix (e.g. metal oxides, organic or coordination polymers). The advantages of heterogeneous catalysis are enormous, the most relevant being the possibility to easily recycle the catalyst by simply filtering it from the bulk reaction mixture. In recent times we prepared some modified alumina by regularly exchanging aluminium with lanthanide cations in the reticular oxide structure. These new materials are suitable for Lewis-acid catalyzed reactions.

Last but not least, our research necessarily leads to significant applicative systems, most of them being of industrial interest. A productive cooperation with a local Company is in progress, aiming at clarifying the aspects of deposition of various transition metals on different flexible surfaces (mainly fabrics) leading to the so called *smart textiles* that may have numerous widespread uses.

Highlights

Our Research Group has achieved in these years an outstanding aptitude in synthesizing and characterizing new coordination compounds of relevant interest. Homogeneous and heterogeneous catalysts and applicative organometallic systems as well, has been extensively studied and fruitfully applied.

Relevant Publications

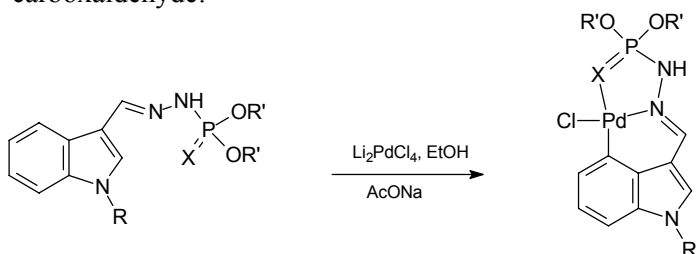
- [1] S.Brenna, T.Posset, J.Furrer, J.Blümel, *Chem.Eur J.* **2006**, *12*, 2880.
- [2] G.A.Ardizzoia, S.Brenna, F.Castelli, S.Galli, G.La Monica, N.Masciocchi, A.Maspero, *Polyhedron* **2004**, *23*, 3063.
- [3] A.Maspero, I.Kain, A.A. Mohamed, M.A. Omary, R.J. Staples, J.P. Fackler Jr., *Inorg. Chem.* **2003**, *42*, 5311.
- [4] G.A.Ardizzoia, S.Brenna, G.La Monica, A.Maspero, N.Masciocchi, M.Moret, *Inorg. Chem.* **2002**, *41*, 610.

Sintesi e Reattività di Composti Ciclopalladati a Scheletro Indolico e Cumarinico Contenenti C-N-O, C-N-N e C-N-S Pincers.

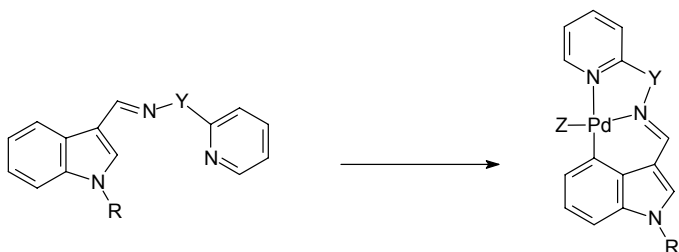
Stefano Tollari

Negli ultimi anni stati stati sintetizzati e caratterizzati diversi composti di ciclometallazione (Pt e Pt) a base indolica e ne è stata studiata l'attività catalitica nelle reazioni di Heck, Suzuki e Stille. Allo scopo di ampliare la casistica, si è pensato di aumentare la capacità chelante del sostituente in posizione 3 dell'anello indolico, e, in un secondo tempo, di passare a derivati riconducibili allo scheletro della cumarina aventi in posizione 4 gruppi di diversa natura legante.

During our studies on cyclometallation of indole derivatives [1], we synthesized the cyclopalladated complexes based on iminoderivatives of indole-3- carboxaldehyde:



R = CH₃ X = O R' = Ph **1** R = CH₃; X = S R' = OEt **2**

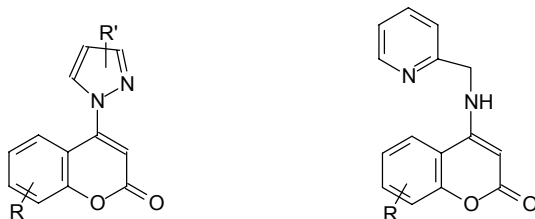


(method A) Li₂PdCl₄, EtOH, AcONa ; (method B) Pd(OAc)₂, CH₂Cl₂ reflux

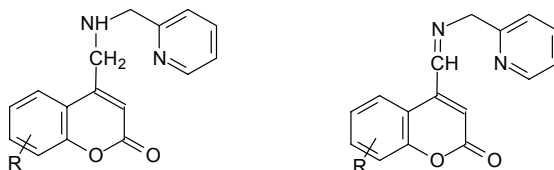
R = CH₃ Y = CH₂ Z = Cl (method A) **3** ; R = CH₃ Y = CH₂ Z = OAc (method B) **4** ;

R = CH₃ Y = NH Z = Cl (method A) **5**

and coumarin derivatives like:



and:



Our future investigations will focus on the catalytic activity of these cyclopalladated compounds (*e.g.* Heck reaction).

Highlights

The expertise of this Group in the synthesis and reactivity of cyclometallated indole and coumarin derivatives has been widely recognized. Recent examples include different substituted indoles [1] and, more recently, coumarin derivatives.

Relevant Publications

- [1] a) S.Tollari, F Demartin, A.Penoni, G.Palmisano, G.Cravotto, *J.Organomet. Chem.*, **2005**, 690, 2017; b) S.Tollari, S.Cenini, A.Penoni, G.Palmisano, *J.Organomet.Chem.*, **2000**, 608, 341; c) S.Tollari, S.Cenini, C.Tunice, G.Palmisano, *Inorg.Chim.Acta*, **1998**, 272, 18; d) S.Tollari, S.Cenini, G.Palmisano, *J.Organomet.Chem.*, **1997**, 527, 93.

Sintesi di Molecole Organiche di Rilevante Interesse Biologico

Giovanni Palmisano, Andrea Penoni, Massimo Sisti

La ricerca del gruppo ha riguardato la sintesi di composti dotati di attività biologica per un loro impiego in campo diagnostico e terapeutico. In particolare sono stati preparati e studiati i complessi di Gd(III) di nuovi leganti poliamminopolicarbossilici allo scopo di individuare mezzi di contrasto per Risonanza Magnetica Nucleare in vivo e di derivati recanti l'anello indolico variamente funzionalizzato. La ricerca ha permesso di sviluppare metodologie sintetiche alternative rispetto a quanto riportato in letteratura, e quindi decisamente innovative. La reazione di anellazione di nitro- e nitrosoareni con alchini ha evidenziato la formazione con ottima regioselettività di molecole eterocicliche a scheletro indolico.

Magnetic Resonance Imaging (MRI) is a powerful and non invasive technique for the visualization of soft tissue anatomy and for the diagnosis of diseases. Currently, about one-third of MRI clinical scans are carried out in the presence of contrast agents (CA) because they add relevant physiological information to the anatomical resolution attainable with this technique. Gd(III) complexes of polyaminopolycarboxylates are commonly used as CA in MRI. The efficiency of a MRI contrast agent is strongly dependent on a number of structural and dynamic parameters related to the coordination environment around the metal center and to the tumbling rate of the complex. As the value of these parameters for the commercial contrast agents is far from optimal, much research has been undertaken with the aim of attaining the high efficiencies predicted by the theory. On this basis, our research group developed a project directed towards the synthesis of new hepta and octadentate polyaminopolycarboxylate ligands and of the corresponding Gd(III) complexes in view of their application as CA in MRI. The octadentate ligands bear functional groups apt to interact with serum proteins, particularly HSA (human serum albumin).

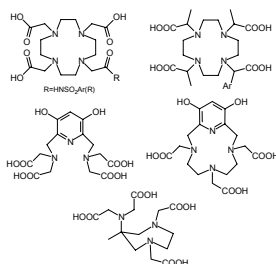
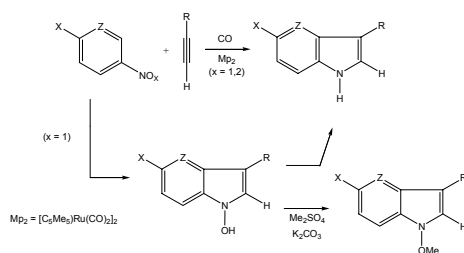


Figure 1. Novel Gd(III) ligands

We have discovered and developed transition metal-promoted reactions between nitroarenes, alkenes and carbon monoxide that produce allyl amines efficiently and with good regioselectivity. Remarkably, corresponding nitroarene/alkyne reactions catalyzed by $[\text{CpM}(\text{CO})_2]_2$ produce 3-substituted indoles regioselectively (Scheme 1), constituting one of the most direct routes to indoles presently available. Followup studies suggest that these reactions proceed via the intermediacy of nitrosoarenes, which undergo a novel cycloaddition with alkynes to produce N-hydroxyindoles. Recent studies of the nitrosoarene/alkyne reactions have provided: 1) an efficient, regioselective route to N-methoxyindoles; 2) mechanistic insight into the cycloaddition reactions; and 3) preliminary indications of their utility in the synthesis of more complex heterocycles, including bioactive azaindoles and indolocarbazoles.



Scheme 1. Indole synthesis via Nitro- and Nitrosoarene Annulation with Alkynes

Highlights

The synthesis of new polydentate paramagnetic ion ligands and compounds bearing the indole nucleus has been achieved through innovative and improved methodologies. These compounds could find useful applications in the field of contrast agents of improved efficiency and in the development of novel pharmaceuticals embodying the indole nucleus [1].

Relevant Publications

- [1] a) S.Aime, C.Cavallotti, E.Gianolio, G.B.Giovenzana, G.Palmisano, M.Sisti, *Org.Lett.* **2004**, *6*, 1201; b) S.Aime, L.Calabi, C.Cavallotti, E.Gianolio, G.B.Giovenzana, P.Losi, A. Maiocchi, G.Palmisano, M.Sisti, *Inorg.Chem.* **2004**, *43*, 7588; c) S.Aime, E.Gianolio, D.Longo, R.Pagliarin, C.Lovazzano, M.Sisti, *ChemBioChem* **2005**, *6*, 818; d) S.Aime, M.Botta, G.Cravotto, L.Frullano, G. B.Giovenzana, S.Geninatti Crich, G.Palmisano, M. Sisti, *Helv.Chim.Acta* **2005**, *88*, 588; e) A.Penoni, J.Volkman, K.M.Nicholas, *Org.Lett.*, **2002**, *4*, 699; f) A.Penoni, K.M.Nicholas, *Chem.Commun.* **2002**, 484; g) A.Penoni, G.Palmisano, G.Broggini, A.Kadowaki, K.M.Nicholas, *J.Org.Chem.* **2006**, *71*, 823.

Studi per la Preparazione di Polipropilene con Proprietà Elastomeriche

Gaetano Zecchi

Nonostante l'elevato numero di polimeri conosciuti ed ampiamente utilizzati in svariati settori, vi è ancora spazio per migliorate proprietà applicative, che possono derivare dall'impiego di nuovi catalizzatori oppure da nuove procedure di polimerizzazione. Ad esempio, sono attuali gli studi volti all'ottenimento di polipropilene con spiccate proprietà elastomeriche. La linea di ricerca qui presentata si inserisce in tale contesto in quanto è mirata alla sintesi di nuovi catalizzatori a struttura metallocenica potenzialmente adatti a promuovere la formazione di polipropilene elastomerico.

Due to the astonishing versatility of their physical properties, polymers are common in a large array of fields of the applied chemistry. Nevertheless, one can still devise new and/or improved properties which would open further possibilities of application. The case of polypropylene is paradigmatic. The long-known atactic/amorphous polypropylene lacks any utility because of its worthless physical properties. Conversely, the isotactic/semicrystalline polypropylene, which has become accessible thanks to the Ziegler-Natta catalysis, is today a ubiquitous material. However, polypropylene endowed with elastomeric properties remains a challenging target. These properties may in principle be displayed by a macromolecular structure which contains alternating sequences of appropriate isotactic and atactic stereoblocks; such a structural feature could be achieved by carefully chosen catalysts and polymerization conditions.

In this context, we are trying in order to develop new metallocene-type catalysts of polymerization, potentially capable of the so-called fluxional behaviour, namely the interconversion between chiral and achiral rotamers on the time scale of the polymerization reaction.

We have taken into account unbridged zirconocene and titanocene derivatives having as organic ligand, in the place of the typical indenyl system of Waymouth's catalyst, partially saturated fused-ring carbocycles of variable size. The synthesized species are represented by the general formula depicted in Figure 1.

The catalytic activity of these unbridged metallocenes in propylene polymerization is under scrutiny and the preliminary results are encouraging. While in certain cases we have obtained polypropylenes endowed with a too low degree of isotacticity, zirconocenes containing the

cyclopentadienyl unity fused to a seven- or eight-membered ring have produced polypropylenes with microstructure, molecular properties and thermal behaviour similar to those observed by Waymouth. The titanium-based catalysts at the moment have not given satisfactory results, but further investigations seem advisable in view of the novelty of such kind of metallocenes.

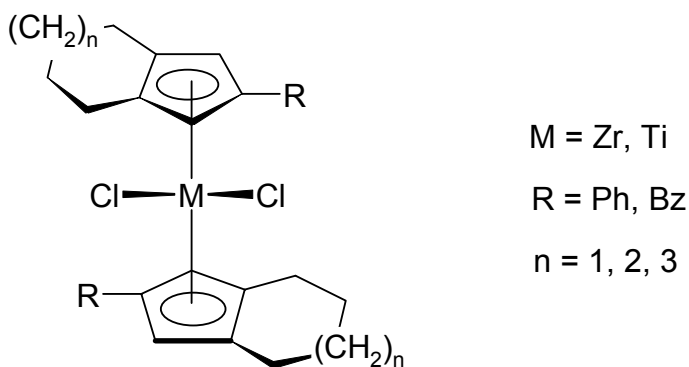


Figure 1. General formula of the new metallocene catalysts of polymerization.

Highlights

The scope of this research line is concerned with organic syntheses in various fields of the applied chemistry such as pigments, polymeric materials, textile fibres and auxiliaries.

Research carried out in collaboration with ISMAC-CNR (Milan) and Stazione Sperimentale per la Seta (Como).

Relevant Publications

- [1] E.Polo, S.Losio, G.Zecchi, F.Bertini, M.C.Sacchi, *Macromol.Rapid.Commun.*, **2004**, 25, 1845.
- [2] S.Losio, G.Zecchi, F.Bertini, M.C.Sacchi, V.Bertolasi, E.Polo, *Macromolecules*, **2005**, 38, 7231.
- [3] M.C.Sacchi, I.Tritto, F.Bertini, S.Losio, G.Zecchi, E.Polo, *Kinetics and Catalysis*, **2006**, 47, 268.

Metodologie Stereoselettive per la Sintesi di Molecole di Interesse Biologico

Umberto Piarulli

Il nostro campo di ricerca risiede nello studio di metodologie sintetiche orientate alla creazione della diversità molecolare. L'interesse é focalizzato su due campi applicativi di estremo interesse: la catalisi e la chimica farmaceutica. Da un lato si lavora sulla sintesi di leganti chirali per reazioni enantioselettive catalizzate da metalli di transizione, dall'altro sulla sintesi di peptidomimetici potenzialmente dotati di attività biologica.

Our field of interest is the investigation of synthetic methodologies aimed at creating molecular diversity. The focus is on two extremely important applications, namely catalysis and pharmaceutical chemistry. In particular, the synthesis of chiral ligands for enantioselective reactions catalysed by transition metals will be pursued on one side while, on the other side, the aim is to synthesize biologically active peptidomimetics with potential biological applications.

Aiming at both novel catalysts and novel active principles, can clearly be seen as a strenuous task. A purely rational approach must ideally be coupled with a more empirical approach. Combinatorial chemistry may be seen as the glue for such methods, as it is based on rational design, followed by high throughput synthesis and activity testing of a large number of compounds in a so-called combinatorial library format. These synthetic methodologies are often taking advantage of solid-phase synthesis, due to its suitability for automated synthesis and purification protocols leading to large libraries in a short time period.

On one side, our interest is the synthesis of novel chiral ligands for enantioselective transformations of scientific and industrial relevance; the combinatorial methodology is used to identify and optimise new ligands for enantioselective reactions accelerated by chiral metal complexes, such as C-C forming reactions, hydrogenations of functionalised olefins, etc. Their screening consists in testing their catalytic properties in parallel, so to identify the most active and selective compound among the library members. To achieve this goal a number of national and international academic and industrial collaborations have been established during the years.

Over the past few decades, the design and development of new unnatural amino acids and peptidomimetics has attracted considerable attention because biologically active peptides are recognized to have significant

therapeutic potential but serious limitations. At least, a partial remedy of these disadvantages, while retaining the biological activity of a peptide, can be achieved by the introduction of modified amino acids or by using peptidomimetics. One challenging aspect of peptidomimetic chemistry is to develop a strategy which results in molecules that adopt specific secondary structures relevant to those found in protein segments or substrate-bound peptides of interest. Despite numerous efforts, there are today only few success stories where chemists have redirected the complex nature of protein-protein interactions. So an important step in this effort is the development of molecular scaffold inducing conformational constraints. In the framework of a project in collaboration with the University of Paris-Sud and the University of Regensburg, regarding unnatural amino acids as foldamers, we are actively engaged in the design and synthesis of cyclic amino acids with well defined conformational properties.

Highlights

Our expertise is in the use of advanced synthetic methodologies in organic chemistry for the synthesis of compounds of biological interest. This is obtained by the use of combinatorial methodologies in the preparation of libraries of chiral ligands [1] for asymmetric catalytic applications such as the enantioselective hydrogenation [2], and the conjugate addition of arylboronic acids to enones [3]. In addition we are actively engaged in the design and synthesis of unnatural amino acids with potential biological activity.

Relevant Publications

- [1] C.Gennari, U.Piarulli, *Chem Rev.*, **2003**, 103, 3071.
- [2] C.Monti, C.Gennari, U.Piarulli, J.G.deVries, A.H.M.deVries, L.Lefort, *Chem.Eur.J.*, **2005**, 11, 6701.
- [3] C.Monti, C.Gennari, U.Piarulli. *Chem. Commun.* **2005**, 5281.

Leganti Chirali a Scheletro Eteroaromatico per la Catalisi Asimmetrica

Tiziana Benincori

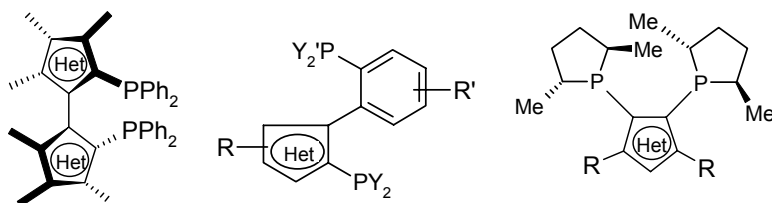
Negli ultimi anni l'importanza della catalisi stereoselettiva nella ricerca chimica è cresciuta enormemente e fra tutte le reazioni studiate l'unica che finora ha avuto applicazioni industriali è la reazione di idrogenazione promossa da complessi di metalli di transizione con leganti chirali. Le ricerche sviluppate sono state rivolte alla realizzazione di nuovi leganti chirali difosfinici a base eterociclica che sono stati utilizzati per la preparazione di catalizzatori chirali con metalli di transizione. I complessi chirali sono stati testati in reazioni di idrogenazione asimmetrica di doppi legami carbonio-carbonio e carbonio-ossigenoprostereogenici portando, in molti casi, ad elevati livelli di enantioselezione. Alcuni catalizzatori sono stati utilizzati per la preparazione di composti chirali ad attività biologica in alto grado di purezza enantiomerica[1].

The synthesis of many pharmaceutical agents and complex natural product relies on the availability of chiral intermediates that can serve as building blocks for further structural and stereochemical elaboration. Asymmetric catalytic synthesis has emerged as one of the most efficient methods to prepare a wide variety of small molecules in highly enantiomerically-enriched form. Accordingly, asymmetric catalysis is playing an increasingly important role in drug design and development. The great commercial interest in asymmetric catalysis, mainly in the hydrogenation reaction, stems from chiral amplification, that is the capacity to generate a plenitude of enantiomerically-enriched material from a negligible quantity of chiral catalyst.

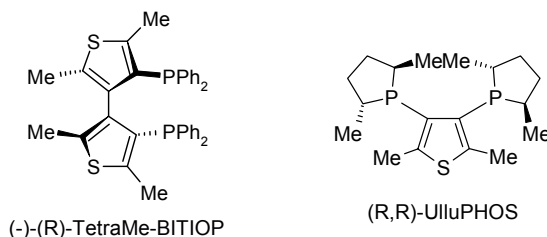
Within this framework, the focus of the research, developed in collaboration with the Department of Organic Chemistry of the University of Milan, is the design and the synthesis of new chiral diphosphines based on five-membered aromatic heterocycles which coordinate to transition metals to give chiral catalysts[2]. The advantages offered by the heterocyclic over the carbocyclic systems are the greater synthetic availability and the possibility of varying the electronic properties of the ligands. In fact, five-membered aromatic heterocycles can be very electron-rich or electron-poor and it is evident that the electronic availability of the phosphorus groups must be directly influenced by the electronic properties of the supporting heterocycle. On this basis, different class of diphosphines, reported in **Scheme 1**, have been realized as ligands of rhodium or ruthenium and the resulting

complexes tested in enantioselective hydrogenations of prostereogenic carbon-carbon and carbon-oxygen double bond giving in many cases excellent results both in term of activity and enantioselectivity.

Scheme 1



In particular, the best ligands for this kind of reaction are the ones nicknamed tetraMe-bitiop [3] and UlluPhos [4], reported below, which are the electron-riches of these series. These ligands are produced at industrial level by Chemi S.p.A, holder of the patents for the synthesis and the use of all these heterocyclic diphosphines.



Highlights

The expertise is related to the design and synthesis of new chiral diphosphine ligands, to the characterization of their transition metal complexes and to their application as catalysts in homogeneous stereoselective reactions.

Relevant Publications

- [1] T.Benincori, S.Bruno, G.Celentano, T.Pilati, A.Ponti, S.Rizzo, M.Sada, F.Sannicolò, *Helv. Chim. Acta*, **2005**, *88*, 1776.
- [2] F.Sannicolò, T.Benincori, S.Rizzo, S.Gladiali, S.Pulacchini, G.Zotti, *Synthesis*, **2001**, *15*, 2327.
- [3] T.Benincori, E.Cesarotti, O.Piccolo, F.Sannicolò, *J.Org.Chem.*, **2000**, *65*, 2044.
- [4] T.Benincori, T.Pilati, S.Rizzo, F.Sannicolò, M.J.Burk, L.deFerra, E.Ullucci, O.Piccolo, *J.Org.Chem.*, **2005**, *70*, 5436.

Sintesi di Sistemi Eterocicli Azotati di Potenziale Attività Biologica e Interesse Farmacologico

Gianluigi Brogginì

Una percentuale sempre maggiore di composti organici con applicazione pratica in svariati ambiti possiede una struttura eterociclica azotata. Ne consegue che per il chimico organico di sintesi è sempre attuale il compito di soddisfare la richiesta di nuove molecole dotate di tali strutture attraverso processi di sintesi che devono essere efficienti sia in termini di resa e di selettività sia in termini di metodologie a basso impatto ambientale. Il conseguimento di tale obiettivo è stato perseguito tramite l'impiego di i) cicloaddizioni 1,3-dipolari nella versione intramolecolare, ii) processi di ciclizzazione intramolecolare catalizzata da palladio.

The wide use of nitrogenated heterocycles in different application fields justifies the continuous research of new compounds having such structures. The efficiency of their synthesis depends on yields and selectivity of the process as well as on environment-friendly methodologies. On this context, the attention is focused on the synthesis of nitrogen-containing heteropolycyclic compounds endowed with biological activities and pharmacological interest. The targets are pursued developing along two different directions, both in their intramolecular version: *i)* Heterocyclization processes through palladium-catalyzed C-C or C-N bonds formation; *ii)* Application and development of 1,3-dipolar cycloadditions.

Different typologies of Pd-promoted processes such as regioselective Heck and Buchwald-Hartwig reactions, aminations and amidations of unactivated ethylenic bond promoted by Pd(II) species in the presence of an oxidative reagent, domino processes with a double C-H functionalization and oxidative coupling have been successfully employed.

The leading features of the cycloadditive methodology rely upon intrinsic peculiarities of the intramolecular cycloaddition process, particularly in terms of regiochemical and stereochemical constraints. When using nitrones as 1,3-dipole, the easy manipulation of the primary isoxazolidine cycloadducts constitutes a valuable way to achieve polifunctionalized compounds.

The research activity has tackled the synthesis of molecule structures containing indole or 1,4-benzodiazepine rings, two of the most widespread heterocycles in natural and unnatural compounds. In particular, the former constitutes the *core* of an important class of alkaloids and biologically active

compounds, the latter is contained in many drugs having anti-anxiety, anti-depressant, anti-convulsant and muscle relaxant properties. Some examples of the synthesized structures are collected in Figure 1.

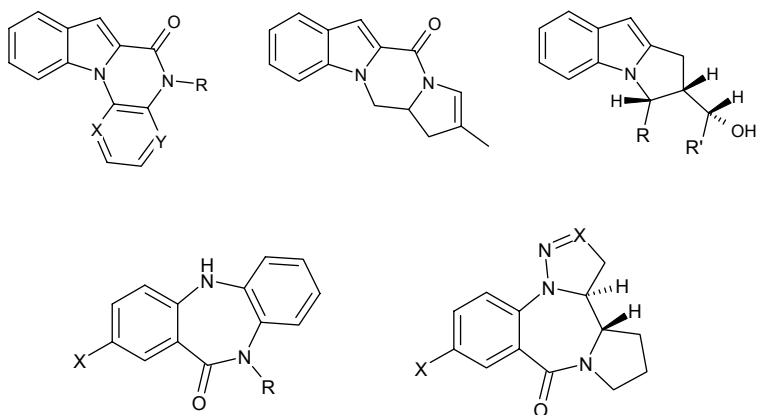


Figure 1. Some examples of synthesized structures.

Highlights

The heading topic of this research activity is focused on the construction of molecules containing indole[1] and 1,4-benzodiazepine[2] systems. Intramolecular palladium-catalyzed heterocyclizations and cycloadditive strategy were taken in account as suitable methodologies to attain the goal.

Relevant Publications

- [1] (a) E. M. Beccalli, G. Broggin, C. La Rosa, D. Passarella, T. Pilati, A. Terraneo, G. Zecchi, *J. Org. Chem.*, **2000**, *65*, 8924. (b) G. Abbiati, E. M. Beccalli, G. Broggin, C. Zoni, *J. Org. Chem.*, **2003**, *68*, 7625. (c) G. Abbiati, E. M. Beccalli, G. Broggin, M. Martinelli, G. Paladino, *Synlett*, **2006**, 73.
- [2] (a) E. M. Beccalli, G. Broggin, G. Paladino, A. Penoni, C. Zoni, *J. Org. Chem.*, **2004**, *69*, 5627; (b) E. M. Beccalli, G. Broggin, G. Paladino, C. Zoni, *Tetrahedron*, **2005**, *61*, 61; (c) G. Broggin, I. De Marchi, M. Martinelli, G. Paladino, T. Pilati, A. Terraneo, *Synthesis*, **2005**, 2246.

Simulazione di Sistemi Chimici Complessi

Aldo Gamba, Ettore Fois, Gloria Tabacchi

Lo studio dell'evoluzione temporale di sistemi di interesse chimico consente in linea di principio l'ottenimento di un quadro completo di processi reattivi, dalla energia di attivazione ai meccanismi e velocità di reazione. La tecnica della dinamica molecolare, nell'ambito delle simulazioni numeriche, è la tecnica regina in questo campo. Infatti consente, mediante l'utilizzo di opportune approssimazioni ed attraverso la conoscenza delle forze di interazione fra gli atomi costituenti il sistema una analisi dettagliata dei moti nucleari in condizioni di temperatura e pressione prossime ai sistemi reali. In questo ambito, la dinamica molecolare da principi primi, metodo di Car-Parrinello (CPMD) si e' rivelata un potente strumento di predizione e conferma nello studio del meccanismi di reazione in vari sistemi, che spaziano in vari campi tecnologicamente rilevanti quali la catalisi industriale a basso impatto ambientale e la catalisi enzimatica. L'utilizzo di tecniche a la Car-Parrinello, che si basano sul calcolo delle forze di interazione fra i nuclei attraverso la Teoria del funzionale densità (DFT) ad un costo computazionale relativamente modesto, utilizzando algoritmi che crescono proporzionalmente ad $N(\ln N)$, con N il numero di particelle del sistema, consente lo studio dell'evoluzione temporale ab-initio di sistemi composti da qualche centinaio di atomi. Ciò consente lo studio ad esempio di porzioni rilevanti di superfici attive cataliticamente, catalizzatori cristallini microporosi (zeoliti), inoltre consente un approccio ab initio alla modellizzazione dei siti attivi di sistemi proteici enzimatici. La rilevanza delle simulazioni numeriche, ed in particolare delle simulazioni da principi primi risiede nel possibilità di ottenere informazioni difficilmente accessibili sperimentalmente. In questa ottica sono auspicabili sinergie ed integrazioni fra la simulazione e l'esperimento.

The study of the time evolution of systems of chemical relevance allows in principle to obtain a complete picture on reactive processes, from activation energies to reaction mechanisms and rates. In this context, molecular dynamics can be regarded as the choice technique among numerical simulations approaches. With the use of suitable approximations and the knowledge of interaction forces between atoms in the system, molecular dynamics simulations allow a detailed analysis of nuclear motion at temperature and pressure conditions close to those in real systems. In particular, first principles molecular dynamics (Car-Parrinello method,

CPMD), has proved to be a powerful approach in confirming and also predicting reaction mechanisms in different systems, ranging from technologically relevant fields such as low ambient impact industrial catalysis and enzymatic catalysis. The use of simulation techniques a-la Car-Parrinello allows to study by first-principles the time evolution of systems composed by a few hundredths of atoms. Such techniques are based in fact on the calculation of the interaction forces on atoms via the Density Functional Theory (DFT) at a relatively low computational cost by adopting $N(\ln N)$ numerical algorithms, where N represents the number of particles in the system. With this type of approaches, the study of chemically complex systems becomes therefore accessible. For instance, relevant portions of catalytically active surfaces or microporous crystalline catalysts (zeolites) may be investigated from first principles; moreover, the ab initio modelling of even more complex systems such as active sites in enzymes may also be achieved. The relevance of numerical simulations and in particular of first principles simulations derives from the fact that they allow to gain information difficult to access from experiment. In this view synergies and integration between experimental and simulation approaches should be pursued.

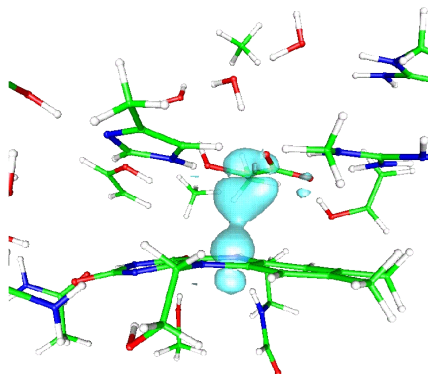


Figure 1. Electron transfer event in a simulation of an enzymatic redox reaction.

Highlights

The expertise of this Group is the modelling via computer simulation of complex systems [1].

Relevant Publications

- [1] E.Fois, A.Gamba, C.Medici, G.Tabacchi, *ChemPhysChem.*, **2005**, *6*, 1917; R.Tubino, E. Fois, A.Gamba, G.Macchi, F.Meinardi, A.Minoia, *Studies Surf. Science and Catal.*, **2005**, *155*, 501; E.Fois, A.Gamba, G.Tabacchi, *ChemPhysChem.*, **2005**, *6*, 1237; C.Ceriani, A.Laio, E.Fois, A.Gamba, R.Martonak, M.Parrinello, *Phys. Rev.B*, **2004**, *70*, 113403.

Studi di Cluster di Elio Contenenti Impurezze

Dario Bressanini, Gabriele Morosi

Negli ultimi anni i cluster di Elio si sono affermati come nanocriostati e nanocalorimetri ideali. Hanno consentito lo sviluppo di spettroscopie ad elevata risoluzione, lo studio dell'effetto solvente a livello microscopico e della reattività chimica a temperature prossime a 0 K. Dal punto di vista teorico, gli effetti quantistici rilevanti in questi cluster richiedono l'utilizzo di metodi Monte Carlo quantistici capaci di trattare tutti i gradi di libertà accoppiati.

In recent years Helium clusters have attracted the attention of a growing number of experimentalists and theoreticians. These systems offer the unique opportunity to study how matter properties change as a function of the number of atomic and molecular species in the cluster, bridging the gap between isolated gas phase species and bulk matter limit. Clusters can pick-up an impurity and so it is possible to study the effect of the solvent on the solute at microscopic level. Even small clusters show extraordinary properties such as superfluidity. From the theoretical side, the relevant quantum effects in these clusters require the development of methods that treat all the coupled internal degrees of freedom. The best methods to date are the quantum Monte Carlo methods: in particular the diffusion Monte Carlo method can treat the correlation in a very efficient way, in theory exactly. Weakly bound atomic and molecular clusters are among the most investigated systems using quantum Monte Carlo methods.

During the last few years, we have developed several algorithms within the quantum Monte Carlo methods. In particular, a more accurate approximation to the propagator than the traditionally employed Trotter's one, was proposed to improve the simulation efficiency. As to the problem of the wave function optimization, we have developed a robust algorithm that allowed us to optimize the wave function even for highly problematic systems, if tackled by the variance minimization, as the He trimer. The efficiency of Variational Monte Carlo simulations was improved by the delayed rejection algorithm. The use of wave functions built by the finite elements method, using splines as basis functions, was suggested to overcome the difficulties met by standard methods. We have examined the problem of the nodal structure of the wave function to reduce the nodal bias.

We have investigated the electronic structure of atoms, molecules and of positron complexes. As to the simulations of He clusters containing

impurities, we have investigated the stability and the structure of ^4He clusters including H^- , and of clusters including Ag, investigating also the influence of the number of He atoms on the Ag spectrum. We were the first to investigate mixed $^3\text{He}/^4\text{He}$ clusters, examining clusters up to 3 fermions in their ground and excited states.

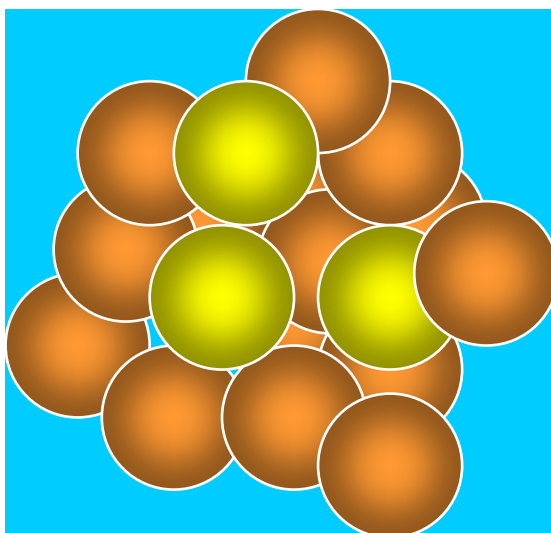


Figure 1. View of a configuration of $^3\text{He}_3\ ^4\text{He}_n$ mixed cluster.

Highlights

The contributions of this Group to the development of quantum Monte Carlo methods have been widely recognized [1-3]. Quantum Monte Carlo simulations of positronic and exotic systems [4,5] and of mixed ^3He and ^4He clusters [6] evidence the power and flexibility of these methods.

Relevant Publications

- [1] D. Bressanini, G. Morosi, S. Tarasco, and A. Mira, *J. Chem. Phys.*, **2004**, *121*, 3446
- [2] D. Bressanini, G. Morosi, and S. Tarasco, *J. Chem. Phys.*, **2005**, *123*, 204109
- [3] D. Bressanini and P. J. Reynolds, *Phys. Rev. Lett.*, **2005**, *95*, 110201
- [4] S. Chiesa, M. Mella, and G. Morosi, *Phys. Rev. A*, **2004**, *69*, 022701
- [5] L. Bertini, M. Mella, D. Bressanini, and G. Morosi, *Phys. Rev. A*, **2004**, *69*, 042504
- [6] D. Bressanini and G. Morosi, *Few-Body Syst.*, **2004**, *34*, 131

Il Metodo HF-HL

Giorgina Corongiu

Il confronto delle curve di energia potenziale calcolate con il metodo Hartree-Fock, H-F, e con il metodo Heitler-London, HL, porta ad un approccio che consiste in una combinazione lineare variazionale delle due approssimazioni. Questo nuovo metodo, HF-HL, predice correttamente formazione e dissociazione di legami; inoltre, la correzione dell'energia di correlazione può essere introdotta sia a livello di elettroni di valenza sia a livello di elettroni di core. Applicazioni del metodo HF-HL alla determinazione di curve di energia potenziale di molecole diatomiche hanno mostrato risultati molto promettenti quando confrontati con dati sperimentali.

The Hartree-Fock, HF, method provides a most useful starting point for the computation of atomic and molecular wave functions. The method suffers from the correlation energy error, which leads also to highly incorrect electronic densities at large internuclear distances and at dissociation. The correlation error is generally corrected either *variationally*, *perturbationally*, or *semi empirically*. The HF method was introduced in the early 1930, shortly after the Heitler and London, HL, computation of the ground state of the H₂ molecule. The HL approximation is the starting point of the valence bond approximation. There is also correlation error in the HL and VB methods resulting both from the use of un-correlated separated atoms and insufficient correlation in the new (extra atomic) electron pairs formed, concomitant with the formation of chemical bonds. These errors can be dealt with by considering additional VB structures.

A comparison of the HF and the HL approximations [1] shows that the restricted HF approximation grossly fails to model the breaking of a molecular bond (a well known failure of the model), whereas the HL not only dissociates correctly (by construction) but can provide also molecular binding. A second conclusion is based on the computations for F₂: on one hand we note an improvement passing from the HF to the HL functions, but, far more importantly, no molecular binding is predicted in either approximation. Therefore, the overall conclusion is that both the HF and the HL methods are for selected cases incapable of yielding even qualitatively correct predictions for simple molecules. Neither method appears fully adequate as a zero order approximation for describing bond formation and bond breaking. Therefore, before attempting to obtain more

accurate non-relativistic energies we have searched for a somewhat more realistic model (even if still qualitative) and then, exploiting available modern and well tested quantum chemical techniques we have attempted to introduce the needed correlation corrections.

We have analyzed the following “naïve” proposal: since the Hartree-Fock approach is generally valid for near equilibrium geometries (both for ground and excited states), but often fails at large distance, particularly at dissociation, and since the HL approach is particularly valid at large distance, but can be problematic for computations of excited states and sometime fails to predict bond formation, it seems reasonable to explore the feasibility of merging the two complementary approaches, extracting the best from each variationally. Further, since the HL approach stresses a localized description, inherent in the explicit use of atomic orbitals, whereas HF, with molecular orbitals, gives delocalization over the entire molecular framework, it seems reasonable to use the HL function as the leading term of a linear expansion to correlate mainly the electrons of the atoms of the molecule and to use the HF function as the leading term of an expansion introduced to correlate mainly the valence electrons. This new approach, HF-HL, has been implemented as a three-successive-step process, each step well defined both in the physical goals and numerical algorithms. Numerical results for hydrides and homonuclear molecules have been reported [1].

Highlights

In the last decades we have concentrated our attention in the correlation energy problem for chemical systems, searching for models [1-2], either ab initio or semiempirical, alternative to standard methods.

[1] G. Corongiu, *Int. J. Quantum Chem.*, **2005**, *105*, 831.

[2] E. Clementi, G. Corongiu, *Int. J. Quantum Chem.*, **2005**, *105*, 709.

Nuovi Metodi Elettrochimici per la Determinazione e Speciazione di Metalli in Traccia in Matrici Ambientali

Carlo Dossi, Damiano Monticelli

I metodi elettrochimici offrono grandi possibilità nella soluzione di problemi analitici in campo ambientale. Questo gruppo di metodiche è infatti caratterizzato da elevate sensibilità e dalla capacità di analizzare matrici con caratteristiche chimico-fisiche molto diverse tra loro come acque di mare e campioni di neve e ghiaccio. I metodi di stripping catodico sfruttano in particolare la riduzione all'elettrodo di un opportuno complesso organico del metallo, abbinando ad un'elevatissima sensibilità la capacità di determinare selettivamente una sola specie del metallo studiato, rendendo possibile lo studio delle specie metalliche in traccia presenti in ambiente. La ricerca di nuovi complessanti, la possibilità di sfruttarli per determinare la speciazione degli elementi in traccia e la loro applicazione a campioni reali e a nuovi approcci strumentali, quali gli elettrodi "screen-printed", costituiscono gli argomenti di indagine di questo gruppo di ricerca.

Electrochemical methods have demonstrated their ability in solving trace element analytical issues since many years. In particular, cathodic stripping methods make use of the reduction of an organic complex of the metal for its determination. This method shows very high sensitivity, the possibility to analyse different matrixes (from snowmelt to seawater) and the capacity to perform speciation analysis of trace metals. The interest in the latter feature stems from the observation that the form of the metal is as important as its total concentration in defining its bioavailability, toxicological, ecotoxicological and geochemical behaviour. As an example, the mobility from one environmental compartment to another and the transport inside a compartment are strictly related to the chemical form of an element, as well as the interaction of trace metals with the biosphere. The complexation of trace elements in natural waters is thus of particular environmental relevance because it controls their behaviour in solution. Anyhow, several classes of natural ligands are present in water bodies, differing in their nature, origins, concentrations and complexing abilities, making speciation analysis a difficult task. Cathodic stripping voltammetry (CSV) has been recognised as a very powerful tool for speciation of trace amount of metals and the only consistent method in many cases. Up to now, a number of CSV methods exists for several metals, but more sensitive and reliable ones are continuously sought for both total metal determination and speciation

analysis, also by our research group. The application of existing methods [3] to complex, new matrixes and the development of new ones, e.g. searching novel, more performing organic ligands for CSV or new instrumental approaches, as the screen-printed microelectrodes, is accomplished by a deep understanding of chemical and electrochemical processes involved.

Particularly, these techniques were optimised for the speciation of copper ion in remote environment ([1], [2]): a further example of a research in the environmental field by the use of CSV methods is presented in Figure 1.

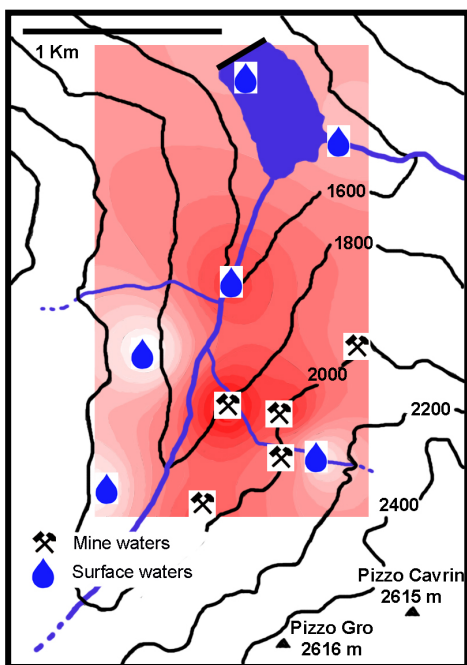


Figure 1. A model for Uranyl (UO_2^{2+}) ion distribution in a high altitude, uranium former mining site (Val Vedello, Sondrio, Italy) based on eleven water samplings (sampling points of surface and mine waters are shown). Uranyl ion concentration, determined by cathodic stripping voltammetry, increases from white to red: high concentrations in the mining area and downhill spreading of uranium are evident.

Highlights

Developing new instrumental protocols and solving analytical problems in trace metal environmental analyses (both total concentration determination and speciation analysis) is the main research area of this Group.

Relevant Publications

- [1] D. Monticelli, C. M. G. van den Berg, A. Pozzi, C. Dossi, *Austr. J. Chem.*, **2004**, *57*, 945-949.
- [2] A. Ploger, E. Fisher, H.P. Nirmaier, L.M. Laglera, D. Monticelli, C.M.G. van den Berg, *Limn. Ocean.*, **2005**, *50*, 995-1010.
- [3] D. Monticelli, R. Psaro, A. Pozzi, C. Dossi, S. Recchia, *Anal. Bioanal. Chem.*, **2005**, *383*, 115-121.

Studio dell'Interazione tra Monumenti ed Inquinanti Atmosferici e Caratterizzazione Analitica di Materiali Lapidei

Andrea Pozzi, Laura Rampazzi

Gli effetti dell'inquinamento sul patrimonio artistico è sempre più di attualità. In particolare, la comparsa di 'nuovi inquinanti' legati alle sempre più invasive attività antropiche richiede studi approfonditi sul loro effetto sulle superfici dei monumenti sia outdoor che indoor, al fine di progettare strategie di prevenzione e conservazione. L'approccio del Gruppo consiste sia nell'analisi degli inquinanti depositati su superfici di monumenti scelti come casi-studio, che il monitoraggio del deposito su provini posizionati in aree a differente inquinamento. L'attività di ricerca del Gruppo comprende inoltre la caratterizzazione analitica di materiali lapidei, quali malte storiche e antichi manufatti in marmo dell'area lariana, finalizzata a studi di tecniche artistiche, provenienza e datazione.

The scientific activity of the Group deals with many topics of analytical chemistry in Cultural Heritage. One of the topics is the interaction between environmental pollutants and historical monuments. The deep knowledge of the mechanisms of degradation of the artistic surfaces has recently become of main concern, in order to establish proper strategies in terms of conservation plans and materials. In particular, the Group has undertaken a new analytical approach, considering the historical surfaces as environmental record. By one hand, the characterisation of metals in ultratraces on surfaces of polluted and not-polluted areas could supply important information on their role as catalysts of the degradation processes and by the other clarify the role of surfaces in determining the air quality of the same areas. The role of atmospheric pollutants in the degradation is investigated in various ways, e.g. by analysing the pollutants already deposited on monuments chosen as case-studies and located in polluted areas and by monitoring the deposition on stone specimens located in areas characterised by different levels of pollution. The chemical data, in some cases elaborated with chemometric methods, are always correlated to the meteorological conditions of the monitored area. A project carried on in collaboration with other institutions of research is in particular focused to indoor museums, comparing the deposition of pollutants on stone artefacts and the active sampling of particulate matter in the same rooms. The analyses of the main and minor components of pollutants are carried on developing analytical procedures based on spectroscopic and

chromatographic techniques, while trace metals are determined by electrochemical and LA-ICP-MS techniques. Particular attention is always paid to the steps of sampling from the monuments and pre-treatment of the samples.

Another relevant topic of research regards the analytical characterisation of historical mortars and marble monuments, in collaboration with archaeological institutions. In some cases the investigation has a diagnostic purpose and is preliminary to conservation works: the nature of both materials and degradation products helps in fact to project the best conservation work and materials. In other cases, the analytical campaign aims at enlightening the provenance of the raw materials and the building sequence in historical monuments, by clarifying the chemical and mineralogical composition of mortars.

Highlights

Recent publications [1-3] corroborate the expertise of the Group both in the analytical characterisation of historical surfaces and in the investigation of their interaction with atmospheric pollutants.

Relevant Publications

- [1] A.Pozzi, F.Cariati, P.Fermo, V.Consonni, R.Todeschini, *Ann.Chim.(Rome)*, **2000**, *90*, 413.
- [2] A.Sansonetti, R.Bugini, L.Rampazzi, S.Della Torre, R.Segattini, E.Rosina, *Materials Evaluation*, **2003**, *61*, 604.
- [3] L.Rampazzi, A.Pozzi, A.Sansonetti, L.Toniolo, B.Giussani, *Cement and Concrete Research*, **2006**, *in press*.

Sviluppo di Tecniche Spettrometriche e Chemiometriche per la Caratterizzazione di Materiali

Sandro Recchia, Barbara Giussani

Lo sviluppo di nuove tecniche e metodologie spettrometriche per l'analisi di materiali di differente origine può essere visto come il comune denominatore delle attività di ricerca di questo gruppo. Partendo da problemi analitici reali vengono studiate, realizzate ed ottimizzate tecniche originali che possono portare allo sviluppo di prototipi o di nuovi protocolli analitici. La complessità dei dati derivanti dalla caratterizzazione dei materiali richiede spesso l'utilizzo di tecniche di elaborazione multivariata. Tali tecniche, utilizzate a partire dalla fase di progettazione dell'esperimento alla fase di rielaborazione dei dati, consentono di estrarre la massima informazione da insiemi di dati complessi.

Spectrometric techniques embody such a huge number of methods and instrumentations, that surely represent the most powerful tools for materials characterisation. Continuous efforts are devoted to improve their diagnostic capabilities by the development of new methodologies and new instruments. In both cases, original ideas and concepts often come from the academic community, as the result of the resolution to specific problems.

In this field, our group possesses experienced skills in the utilisation and the development of techniques such as Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transformed Spectroscopy (DRIFTS), Extended X-ray Absorption Fine Structure spectroscopy (EXAFS) and Quadrupolar Mass Spectrometry (QMS) coupled to various other devices. Most of the work that was carried out by some of us regards the development of environmental chambers for heterogeneous catalysts that allows the observation of specimens under *operando* conditions, which means recording spectra under real working conditions [1]. Our group is now involved in the development of a novel EXAFS reaction chamber for the collection of spectra in the transmission and fluorescence mode that again works under *operando* conditions.

In the last ten years we have studied and realised the hyphenation of QMS with other instrumentations [2], but now our interest in mass spectrometry is mainly focused on the development of ICP-MS (Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry) methodologies related to the characterisation of environmental and archaeological samples. As an example, we are studying the combination of Laser Ablation with ICP-MS for the chronological determination of elements in tree rings. The narrow spot-size of the laser,

coupled with the high sensibility of ICP-MS is fundamental to reach the target of a time-resolved determination of trace elements (see figure 1). However it must be pointed out that the optimisation of such a technique is not trivial.

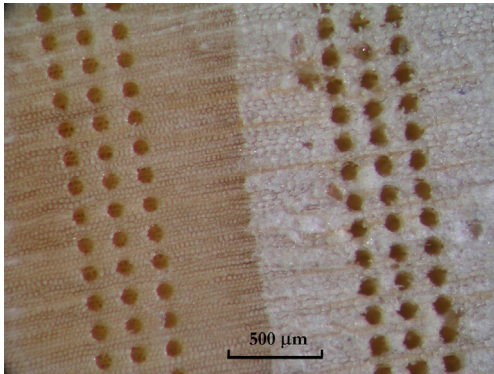


Figure 1. A wood core sample investigated with LA-ICP-MS: winter ring shows a dark brown colour while vernal ring shows a light brown colour. Traces of ablation spots are visible.

ICP-MS is also utilised for the determination of stable isotope ratios in samples of archaeological interest. Stable isotope ratios (copper and lead as an example), together with trace elements concentration, can guide to provenance and dating of objects such as ancient metal objects. Due to the complexity of the analysed systems and the great amount of data, chemometric methods must be used in order to recognize important variables in such studies and extract from data relevant information.

Highlights

This group possess well established expertises in the design and development of original instrumentation and methodologies for materials characterisation. Chemometric skills cover the optimization of the analytical methodologies, the development of multivariate methods for quantitative analysis and the interpretation of the results.

Relevant Publications

- [1] V. Dal Santo, C. Dossi, A. Fusi, R. Psaro, C. Mondelli, S. Recchia, *Talanta* **2005**, 66, 674.
- [2] C. Dossi, A. Fusi, G. Molteni, S. Recchia and R. Psaro, *Analyst* **1997**, 122, 279.

Studi Geologici delle Dinamiche Profonde e Superficiali della Catena Alpina

Silvana Martin

Le indagini geofisiche della catena alpina, integrate dagli studi petrologici e mineralogici hanno permesso di conoscere meglio la struttura e la dinamica delle zone di subduzione. L'analisi delle faglie e delle morfostrutture del territorio alpino hanno permesso di delineare l'evoluzione dinamica delle porzioni superficiali della catena.

During the last years, geophysical investigations allowed to gain new constraints to the deep structure of the Alps (EGT, NFP20, CROP). They confirmed the presence of an European lithospheric slab undergoing the Apulian (African) continental margin (Fig. 1a). Moreover, these studies highlight the depth of principal transition levels, such as the LAB and the Moho, i.e., the crust-mantle boundary. At the shallower levels, due to the major thrust faults within the upper crust, the Alps show a multilayered sandwich structure.

The knowledge of the Alpine structure allows other field of research to be improved. They concern i) geophysical modelling of subduction zones, ii) petrology and mineralogy of the subducting slab and the overlying mantle wedge, iii) late structural evolution of the orogen, his uplift, and development of brittle tectonics, possibly with environmental applications (superficial deformations, landslides etc.).

The geophysical modelling of continental subduction zones and following exhumation was carried out for the Ulten rock complex in the Eastern Alps [1]. This metamorphic complex, belonging to the Austroalpine Nappe, and composed of crustal gneisses with slivers of mantle material with ultra high pressure mineral associations provided relevant information about subduction rates and the kinematics of exhumation of subducted lithosphere. Thermal and rheological modelling can be also joined. It mainly concerns with the definition of the BDT which strongly controls lithospheric strengths and determines levels below which major tectonic stresses can not be more stored within the rocks in relation with active seismic faulting [2].

The study of the rocks that compose exhumed ancient subduction zones can also provide important insights. Our Group worked on the rocks belonging to the Ulten (Eastern Alps) [3, 4] and the Zermatt-Saas (Western Alps) units. We studied the crust-mantle exchange processes in subduction zones, the so-called "crustal metasomatism" that is displayed by the Ulten

peridotites (Fig. 1 b). These rocks are slices of lithospheric mantle that entered a subducting continental slab, today represented by gneisses, via a sinking mechanism assisted by shear concentration near the top of the continental slab [1]. This process occurred at pressures of ca. 3 GPa (ca. 100 km) and temperatures of ca. 850°C. The peridotites became enriched in particular elements (LILE), most likely carried by fluids from the slab. The study of tectonic and superficial dynamics of the Alps improve the knowledge of their evolution. Our Group developed research projects both on regional structural geology [5] and applied geology. We had collaboration with the Lombardy Region and Como Province, to study catchments at the northern termination of Lake Como (S. Vincenzo, Liro and Livo), with particular attention to active tectonics, debris flows and landslides, also in relation with seasonal rainfall events and Quaternary deposits [6].

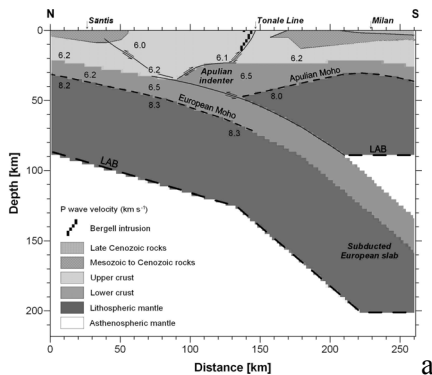


Figure 1. a) Geophysical model of the Central Alps b) Garnet-bearing peridotite from Ulten Valley, Eastern Alps.



Highlights

Our Group studies the Alps, their composition and structure. In particular, our expertise concerns geophysical and petrological modelling, and mineralogy. Geological–environmental applications are also pursued, especially brittle tectonics and landslide characterisation.

Relevant Publications

- [1] G.Ranalli, S.Martin, R.Mahatsente. *Geol. Soc. Sp. Publ.*, **2005**, 243, 159.
- [2] A.Viganò, G.Ranalli, S.Martin, **2006**, in progress.
- [3] S.Tumiati, M.Thöni, P.Nimis, S. Martin, V. Mair. *EPSL*, **2003**, 210, 509.
- [4] S.Tumiati, G.Godard, U. Klötzli, S. Martin, D. Monticelli. *Lithos*, **2005**, in press.
- [5] A. Viganò, L. Cardinetti, S.Martin, M.Zattin, M.G.Malusà. *Rend.Soc.Geol.It.*, **2005**, 1, 166.
- [6] A. Centurini., R. Gambillara, M. Figaroli, S.Martin, *ERB*, **2004**.

Botanica Ambientale e Applicata alla Caratterizzazione del Territorio e Prevenzione del Rischio

Donato Chiatante, Antonino Di Iorio

L'insieme suolo-vegetazione è un sistema complesso e dinamico nel quale i processi erosivi possono variare fortemente a seguito dei cambiamenti che avvengono in seno alla comunità vegetale. Particolarmente determinanti diventano quelle variazioni che riguardano gli apparati radicali delle piante in risposta ad una propria dinamica di sviluppo ontogenetico ma anche in risposta a stimoli ambientali. Conformazione tridimensionale, numero e direzione di crescita delle radici laterali sono alcune delle caratteristiche che influenzano la capacità di ancoraggio di una pianta e che la rendono più o meno adatta al controllo dell'erosione. Lo sviluppo del sistema radicale rappresenta quindi un evento importante non solo perché rappresenta il completamento della morfogenesi complessiva di una pianta ma anche perché determina l'inizio dell'influenza della pianta sulle caratteristiche strutturali del suolo. Proprio per questo motivo lo studio teso ad approfondire le conoscenze sullo sviluppo dell'apparato radicale diventa funzionale anche ai fini di comprendere meglio le dinamiche collegate ai fenomeni di erosione del suolo. In questo senso gli studi degli apparati radicali diventano anche funzionali ad una prevenzione del rischio di erosione.

It is well known that the production of lateral roots at the correct positions and in appropriate numbers enables the plant to establish a root system that is capable to efficiently accomplish water and nutrient uptake and to ensure a good anchorage. The root architecture through complex mechanisms and pathways is determined by the action of genetic factors (intrinsic) and environmental factors (response). In particular, environmental factors affect the root architecture development by acting on the growth of pre-existing lateral root growth or on the emission of new ones. The mechanisms involved in both root architecture development and alteration of this architecture induced by environmental conditions have been extensively studied in crop plants (mainly herbaceous) and in the plant model but are almost ignored in woody plants. In general, it is accepted that in woody plant the emission of lateral from parental roots in primary structure is due to the pericycle cells (and/or parenchymatic cell of primary wood) which are the only cells with the competence to become lateral meristem initials. However, in some woody plants, it was observed that lateral roots can also develop, in

particular conditions, from the secondary structure of the parental root. This behaviour has important consequences on several rooting processes like the root turnover which significantly affects the carbon balance in the soil, and also at root system level with likely changes in its architecture.

It is an interesting challenge to study the pattern of emission of new laterals scaling-up from the knowledge-base research to ecosystem level. In fact, a deeper understanding of root dynamics is critical to describing the integrated response of ecosystems to global change and to understand the ultimate fate of carbon in soil. As consequence, the role of the soil erosion on the carbon balance becomes extremely important. It was observed that both an increase in shoot density as well as an increase in root density resulted in an exponential decrease of concentrated flow erosion rates. Since protection of the soil surface in the early plant growth stages is crucial with respect to the reduction of water erosion rates, increasing the plant root density in the topsoil could be a viable strategy for erosion control.

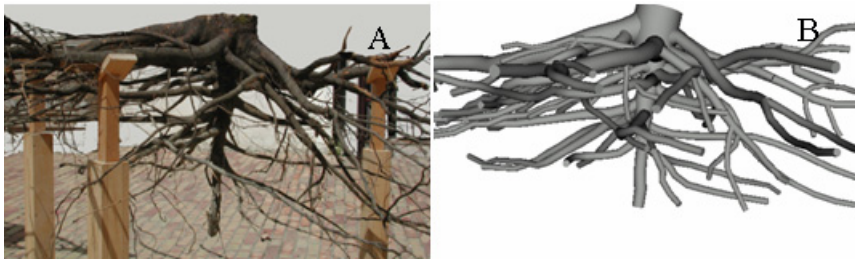


Figure 1. A) photograph of a oak tree root system. B) The image obtained from digitizing with the AMAPmod software.

Highlights

The expertise of this Group in the root system development has been widely recognized. Recent research topics include: root response to drought and fire [1, 2], root system architecture and tree stability [3], adaptation at root system level of woody species to slope condition [4, 5]

Relevant Publications

- [1] D.Chiatante, A.Di Iorio, G.S.Scippa, *Plant Biosystems*, **2005**, 139, 198.
- [2] D.Chiatante, A.Di Iorio, S.Sciandra, G.S.Scippa, S.Mazzoleni, *Exp.Environ.Bot.*, [available online 2005](#).
- [3] A.Di Iorio, B.Lasserre, G.S.Scippa, D.Chiatante, *Annals of Botany*, **2005**, 95, 351.
- [4] D.Chiatante, G.S.Scippa, A.Di Iorio, M.Sarnataro, *J.Plant Growth Regul.*, **2003**, 21,247.
- [5] D.Chiatante, M.Sarnataro, S.Fusco, A.Di Iorio, G.S.Scippa, *Plant Biosyst*, **2003**, 137, 47.

Igiene Industriale: dalla Prevenzione Ambientale alla Tutela della Salute

Gianfranco Peruzzo, Domenico Maria Cavallo

Gli ambiti di ricerca spaziano dalla più tradizionale prevenzione negli ambienti di lavoro fino ai sempre più attuali interessi di sanità pubblica. Tra i settori principali di ricerca vi è lo studio dell'esposizione ambientale e personale alle frazioni più fini del Particolato Aerodisperso nei centri urbani. Altri interessi di ricerca sono rappresentati dalla valutazione della esposizione professionale e degli effetti sulla salute di agenti chimici cancerogeni quali metalli, composti organici, polveri di legno e polveri minerali (asbesto, silice, ecc.). Il campo di interesse si completa con lo studio della qualità dell'aria "indoor" e dell'aria esterna.

A large number of environmental and epidemiological studies produced in all the world has shown that the daily variation of air fine particles is associated with concomitant variation of the morbidity and mortality of the general population in urban areas. The particle-linked increase in mortality has been attributed to adverse effects caused by particles on the cardiovascular and respiratory systems, but the mechanisms through which urban air particles worsen cardiovascular and respiratory diseases are not known. Objectives of our research activities are dealing with the mechanisms through which the urban air particles worsen cardiovascular and respiratory diseases. To this aim we are measuring a set of clinical and functional parameters induced by variation of exposure to fine air particles. Examples of clinical parameters include: ECG Holter, arterial pressure and oxygen saturation of blood; hemogasanalysis; hematologic parameters including plasmatic cytokines and coagulation-related parameters. Moreover, the metabolic plasma and urine pattern are determined with NMR spectrometry to identify modifications of the plasmatic and urinary composition of aminoacids, lipoproteins, glucids, metabolites of drugs and metabolites of xenobiotics. Personal and micro-environmental fine-particle exposure levels are determined by means of continuous and gravimetric methods. Then the collected particles are analysed to determine their chemical composition (inorganic and organic) and also personal and environmental exposure to polyaryl hydrocarbons (PAH) are determined. The exposure data obtained with individual and micro-environmental monitor are used to model exposure of the general population by means of

probabilistic methods (Monte Carlo e Latin Cubes) and they are compared with those obtained through fixed monitoring stations (macro-environment). Exposure assessment plays a key role in the health risk assessment procedure. Total personal exposure to air pollutants can be conceptualized as the sum of exposures from various sources encountered indoors, outdoors and through individual activities.

Given the complexity of these challenges, there are substantial gaps in the knowledge of human population exposure patterns, which build the basis for health risk assessment.



Figures: Breathing apparatus, Personal Protective Equipment and Chemicals in workplace

Highlights

The skill of our Research Group in Industrial Hygiene has been widely recognized as well demonstrated by the last research grants obtained: PM_Care, Wood Dust, IAQ in School, Candles in Indoor Environment.

Researches are mainly carried out in collaboration with Environmental and Occupational Health Department “Clinica del Lavoro L.Devoto”, Faculty of Medicine, University of Milan and Department of Chemical Engineering and Industrial Chemistry, Polytechnic of Milano.

Relevant Publications

- [1] P.Carrer, M.Maroni, D.Alcini, D.Cavallo, S.Fustinoni, L.Lovato, F.Visigalli, *Indoor Air*, **2000**, *10*, 258.
- [2] P.Sartorelli, L.Montomoli, G.A.Sissini, R.Bussani, D.Cavallo, V. Foà, *Toxicol.Ind.Health* **2001**, *17*, 17.
- [3] Y.De Bruin, O.Hanninen, P.Carrer, G.Scotto-Di-Marco, S.Kephalopoulos, D.Cavallo, M.Jantunen, *Epidemiology*, **2002**, *13*, 759.
- [4] D.Cavallo, C.Peruzzo, P.Carrer, *Giornale degli igienisti industriali*, **2004**, *29*, 197.

Tettonica attiva e rischio sismico nel settore Sudalpino Lombardo

Alessandro M. Michetti

La conoscenza del livello di sismicità di una regione è uno degli elementi chiave per la valutazione delle interazioni fra processi naturali e tessuto antropico. I dati strumentali e storici possono risultare inadeguati ai fini di tale conoscenza, in particolare in quelle aree caratterizzate da tassi di attività tettonica non particolarmente elevati. Proprio in queste aree, infatti, la scarsa memoria del terremoto può causare una sottostima dei relativi rischi da parte dei cittadini e delle autorità preposte al governo del territorio. Il margine settentrionale della Pianura Padana costituisce un esempio illuminante in tal senso. Terremoti storici il cui valore di magnitudo può essere stimato dell'ordine di 6.0 - 6.5 hanno generato effetti "catastrofici" in quest'area (ad es. i terremoti di Verona, 3.1.1117; Brescia, 25.12.1222; e del Friuli, 25.1.1348). Il ripetersi di simili eventi nel prossimo futuro determinerebbe un livello di danneggiamento ancora più consistente, a causa del crescente sviluppo industriale e demografico nel N Italia.

The Quaternary evolution, and the accompanying seismic potential, of the Southern Alps foothills in the Lombardy region is still an open problem.

Two major earthquakes were strongly felt in this area during the Medieval Age: the Jan. 3, 1117, Verona and the Dec. 25, 1222 Brescia events (e.g., Magri e Molin, 1986; Guidoboni, 1986; Serva, 1990; Galadini et al., 2001; Guidoboni, 2002). These are the strongest historical earthquakes in the Northern Po Plain, which is one of the most vulnerable areas in Italy to seismic hazards, due to the very high population density and industrialization. Based on ground effects and intensity distributions these earthquakes had magnitude in the order of 6-6.5. We conducted geological and geomorphological analyses and interpreted Po Plain seismic reflection data, gently made available by the Italian oil company ENI E&P, in order to characterize the tectonic environment of these earthquakes and to verify if they can be considered the "characteristic" events for this sector of the Southern Alps. We identified evidence of Quaternary compressive tectonics all along the border between the Southern Alps and the Po Plain in the Lombardy region. Seismic profiles clearly show a belt of fault propagation folds controlled by the Plio-Quaternary growth of several out-of-sequence thrusts (Figure 1). To these structures is possible to asses a possible magnitude comparable with the Dec. 25, 1222 Brescia event, probably with recurrence intervals increasing moving from east (Garda) to west (Insubria).

The case of the M5.2, Nov. 24, 2004, Salò earthquake suggests instead the size of the earthquake that can be considered the “floating” event for the W Southern Alps. Because of the similarity of the tectonic structure and the rheological conditions in the piedmont belt of the Southern Alps between Lake Garda and Lake Maggiore, it is impossible, at this stage of knowledge, to exclude that an earthquake in that range of magnitude can occur anywhere in the study area.

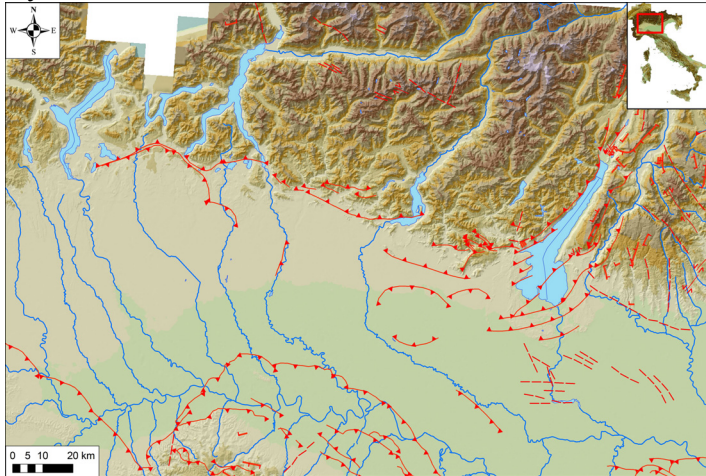


Figure 1. Active and capable faults along the Lombardian Southern Alps piedmont belt.

Highlights

The careful analysis of geological data is of critical value for understanding seismicity in areas with low strain rates. Paleoseismological investigations can provide suitable constraints for calibrating the seismic landscape of these areas, including the W Southern Alps of Italy, a region that is highly vulnerable to seismic hazards.

Researches carried out in collaboration with APAT, Eni E&P and University of Colorado.

Relevant Publications

- [1] A.M.Michetti, F.Audemard, S.Marco, *Tectonophysics*, **2005**, 408, 3.
- [2] G.P.Roberts, A.M. Michetti, *J. Struct. Geol.*, **2004**, 26, 339.
- [3] F.Giardina F., A.M.Michetti, L.Serva, C.Dogliani, *Boll. Geof. Teor. Appl.*, **2004**, 45, 86.

Studi di Pericolosità Vulcanica da Eruzioni Esplosive e da Collasso di Edifici Vulcanici

Luigina Vezzoli, Federico A. Pasquarè

Le eruzioni esplosive ed i collassi di edifici vulcanici sono le maggiori sorgenti di pericolosità vulcanica. Il contributo di questa linea di ricerca riguarda lo studio: a) delle relazioni tra il vulcanismo e la tettonica regionale e magmatica nel controllo della risalita e messa in posto dei magmi; b) dei fattori che predispongono e innescano i collassi laterali degli edifici vulcanici e la formazione di debris avalanche vulcanici, attraverso rilievi vulcanologici e strutturali diretti, analisi litotecniche, modellazioni analogiche e numeriche; c) delle condizioni di messa in posto di corpi magmatici subvulcanici quali dicchi, sheets e laccoliti, attraverso la ricostruzione della loro struttura e geometria; d) della ricostruzione dei meccanismi eruttivi che conducono alla messa in posto dei depositi piroclastici. Le ricerche sono state svolte sui vulcani attivi italiani, Ischia, Etna e Stromboli; delle Ande Centrali, Cotopaxi (Ecuador), Ollagüe (Cile-Bolivia), Tasil (Argentina NW); del Messico occidentale.



Figure 1. The N flank of Cotopaxi Volcano (Ecuador), with the collapse scarp in the glaciated area and the debris avalanche deposits in the foreground.

Among the volcanic hazards, explosive activity and lateral collapses of volcanic edifices are the most catastrophic events. Our contribution to this topic consists in the study of: a) the relationships between volcanism and regional structures; b) the predisposing factors and triggering mechanisms leading to the sector collapse of volcanoes and to debris avalanche emplacement; c) the modalities, conditions and dynamics of emplacement of sub-volcanic magma bodies; d) the eruptive mechanisms leading to the formation of pyroclastic deposits.

The study of the structural factors controlling the rise and emplacement of magmas has been applied in two volcanic regions: The Tastil magmatic complex in the Central Andes (NW Argentina), and Tancitaro Volcano in the Transmexican Volcanic Arc (W Mexico). The Miocene Tastil magmatic complex is located along a transversal fault system that cuts the Andes at 24°S, from the Pacific trench to the foreland. Geological and petrological data have enabled us to characterize the magmatism far away from the trench (about 600 km), explain pluton emplacement in a compressive tectonic environment, and define the role of the andean transversal structures in the ascent of magma. With regard to volcano sector collapses and debris avalanche deposits, we used a multidisciplinary approach, and tested our researches on several active volcanoes: Ischia and Stromboli in Italy, Ollagüe (Chile-Bolivia) and Cotopaxi (Ecuador) in the Central Andes. Ollagüe Volcano, during Pleistocene times, underwent a catastrophic flank collapse that produced a huge debris avalanche deposit. By comparing field data with analogue modelling, the results indicate that the main factor leading the edifice to a state of instability was the magmatic pressure by a cryptodome located at shallow depth. Cotopaxi is an active volcano covered by a summit glacier; 5 ka ago, it underwent a large sector collapse producing a debris avalanche and a 326-Km-long debris flow. The research is focused on defining the volcanic units involved in the debris avalanche process and determining their geotechnical characteristics. These data have been used for back analysis simulation of debris avalanche phenomena and stability analyses of Cotopaxi's flank via numerical modelling.

Furthermore, we carried out several researches on the pyroclastic deposits of Etna Volcano. These studies comprise: Detailed tephrostratigraphy and tephrochronology of the last 4000 years; explosive eruptions physical parameters determination; statistical and numerical frequency evaluation for the main types of explosive eruption; maximum and mean eruption energy, maximum expected event, return time, and probable expected event determinations. The frequency of Etna's eruptive phenomena in the last four centuries has increased and, in particular, its explosive eruptions have become more numerous since the 70s.

Relevant Publications

- [1] F.A.Pasquarè AGU Chapman Conference, Tagayaty City, Philippines, 16-20/11 **2005**.
- [2] P.Del Carlo, L.Vezzoli, M.Coltelli, in: S.Calvari, A.Bonaccorso, M.Coltelli, C. Del Negro, S.Falsaperla Eds., Mt. Etna: Volcano Laboratory, AGU *Geophys. Monogr. Ser.*, **2004**, 143, 77.
- [3] A.Tibaldi, L.Vezzoli, *Geophys. Res. Lett.*, **2004**, 31, L14605.
- [4] M.Coltelli, P.Del Carlo, M.Pompilio, L.Vezzoli L, *Geophys. Res. Lett.*, **2005**, 32, L23307.

Biotecnologie Microbiche Applicate all'Ambiente - Diversità Microbica ed Ecologia Molecolare in Ecosistemi Naturali e Artificiali.

Elisabetta Zanardini

Le biotecnologie microbiche applicate all'ambiente comprendono il trattamento di effluenti e rifiuti con e senza recupero energetico come la depurazione delle acque, la biodegradazione di xenobiotici, la bioremediation di suoli contaminati, il compostaggio ed il trattamento anaerobico con recupero di metano. In questo settore le ricerche sono indirizzate alla selezione di consorzi microbici e colture pure di potenziale interesse biotecnologico per i processi di biodegradazione e biotrasformazione. Recentemente sono state condotte ricerche che prevedono l'utilizzo di microrganismi nell'ambito di un biorisanamento/biorestauro di manufatti artistici al fine di poter rimuovere alterazioni presenti sulle superfici e permettere processi di biopulitura.

Microorganisms have an important role in the environmental decontamination processes for their biodegradation and biotransformation capability towards persistent and recalcitrant compounds. Biotechnologies for the environmental decontamination are wastewater treatment, bioremediation of contaminated soil and water, composting, xenobiotic degradation and anaerobic digestion with methane production [1, 2, 3].

Researches are in progress on the biodegradation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and methyl *tert*-butyl ether (MTBE), a primary constituent (11-15%) of reformulated gasoline, finalised to the bioremediation treatments of contaminated soil and water [2]. The aim is the selection of mixed and pure cultures with degradative capabilities, their microbiological and molecular characterisation and the detection of specific enzymatic and bio-surfactant production.

In addition the study of microbial communities in presence of stress conditions such as heavy metal presence [1], extreme temperature and pH value, low nutrient concentration are an interesting focus of our researches both for the structural and functional analysis and for the selection of bacterial strains which represent an important richness from the biotechnological point of view.

Bacteria are also recently applied for the bioremediation of altered artistic stoneworks [4]. In the field of conservation of cultural heritage, microorganisms are generally associated with the detrimental effects [5, 6];

Modelli Dinamici nello Studio del Destino Ambientale delle Molecole

Antonio Di Guardo

I modelli ambientali per la previsione del destino ambientale dei contaminanti sono degli strumenti correntemente usati nella valutazione dell'esposizione degli ecosistemi. Tuttavia la maggior parte dei modelli disponibili descrive scenari ambientali generalmente statici, dove i cambiamenti, di una serie di parametri (come la temperatura, le precipitazioni o la crescita) non vengono generalmente considerati. Questo gruppo ha sviluppato invece numerosi modelli dinamici nei quali gli scenari ambientali cambiano nel tempo.

Environmental models for the prediction and interpretation of chemical fate are known to be valuable tools in the process of exposure assessment. Most existing models used to describe the fate of chemicals in a variety of environmental scenarios (such as soil, surface water, vegetation) generally consider a 'static scenario', in which a contaminant is discharged at a constant rate and environmental input parameters do not vary during the simulation time. This approach is not suitable in environmental scenarios characterized by daily or periodic changes. This is true for example in situations in which biotic or abiotic factors (e.g. growth, temperature, precipitations etc.) may alter significantly the fate of chemicals. An example of this type of behaviour is the sudden appearance of foliar biomass in forests, which acts as a trap for organic contaminants, efficiently removing them from the atmosphere ("forest as filters for contaminants"). Forest canopies can influence air concentrations temporally and spatially. Given the proportion of the earth's surface covered by forests, their role in influencing pollutant fate on a variety of spatial scales is increasingly considered. In developing environmental fate models, the kinetics of plant accumulation and release of chemicals has been widely studied by our group, especially in different forest types (Figure 1), such as those present at several altitudes in the alpine mountains. Several models were developed by this group: soil models such as the SoilFug Model, designed to study the dynamic fate of chemicals applied to soil (such as pesticides) and a surface water model, (Dyna Model) that describes the fate of a chemical in a dynamic scenario. The Dyna model was applied to Lake Maggiore to study the recent case of DDT contamination. The model showed the time response of the Lake Maggiore system to varying emission scenarios and provided

what are regarded as reasonable estimates of DDT emissions. Bioaccumulation models for aquatic organisms were also developed and applied.

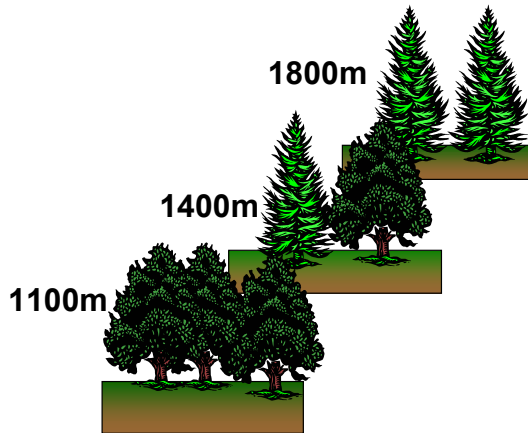


Figure 1. Different vegetation types (deciduous, mixed wood and conifers) studied in the Alps to evaluate the role of forest as atmospheric “filters” for contaminants.

Highlights

The expertise of this Group can be represented by the development of dynamic models such as Dyna Model [1], the recent development of the understanding of the “forest filter effect” [2, 3] and the application of bioaccumulation models for the aquatic marine food web [4].

Relevant Publications

- [1] A. Di Guardo, C. Ferrari, A. Infantino, *Environ. Sci. Poll. Res. Int.*, **2006**, *13*, 50.
- [2] L. Nizzetto, C. Cassani, A. Di Guardo, *Ecotox. Environ. Saf.*, **2006**, *63*, 75.
- [3] F.M Jaward, A. Di Guardo, L. Nizzetto, C. Cassani, F. Raffaele, R. Ferretti, K.C. Jones, *Environ. Sci. Technol.*, **2005**, *39*, 3455.
- [4] K. Borgaa, A. Di Guardo, *Sci. Tot. Environ.*, **2005**, *342*, 281.

Nuovi Aspetti Ambientali del DDT

Roberta Bettinetti

Nonostante il divieto della produzione industriale e dell'uso del DDT di circa una trentina di anni fa in Italia e in buona parte d'Europa, la presenza del composto parentale e dei suoi metaboliti è ancora massiccia nell'ambiente. Questo è stato verificato grazie a studi intrapresi in diversi scenari ambientali. Un primo scenario su scala geografica più contenuta è stato il Lago Maggiore che si è rivelato essere un interessante - anche se sfortunato - caso di studio a seguito della contaminazione da parte di un'azienda produttrice di DDT in attività fino al 1996. Un altro scenario su scala geografica più ampia ha riguardato il monitoraggio delle concentrazioni di vari composti con proprietà pseudoestrogene tra cui il pp'DDE principale metabolita del pp'DDT, nelle diete di 9 paesi Europei nell'ambito di un progetto UE (COMPRENDO Project).

Although pp'DDT usage was strongly limited or banned in most parts of the world during the last three or four decades, the parent compound, its homologues and their metabolites still occur at levels which might pose a risk for many ecosystem components.

A case of DDT pollution of industrial origin was discovered in 1996 in Lake Maggiore, the second largest (212 km²) and deepest (370 m) Lake in Italy, causing concern for wildlife and human health. In assessing the ecological risk to Lake Maggiore wildlife from that period to nowadays, information provided by the Commission for the Protection of Italian and Swiss Waters were integrated with further analysis and ecotoxicological tests were carried out on some autochthonous target species for this insecticide (Fig. 1).

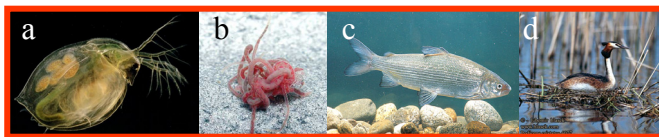


Figure 1. Organisms used to study a trophic-chain transfer of pollutants (a: *Daphnia magna*, b: *Tubifex tubifex*, c: *Coregonus* sp.; d: *Podiceps cristatus*)

Sediments collected at the end of 1997 in the most contaminated bay caused a decrease in fertility and growth of benthic oligochaetes and chironomids, while the 48h IC₅₀ for *Daphnia galeata* (0.76 µg L⁻¹, c.i. 0.43–1.34) was much higher than the DDT concentration in the lake water. The risk of acute

effects on zooplankton should therefore be excluded, while transfer through the trophic web and bioconcentration in fish and fish-eating birds are the most adverse consequences of DDT contamination in Lake Maggiore [1, 2, 3].

Recent studies suggest that low levels of xenobiotics may play an important role in reproduction and in developmental disorders. Even if it's well-known that DDT compounds can cause these adverse effects, nowadays a NOEC for humans is not known and only an ADI has been proposed. In the framework of the EU Project COMPRENDO for the comparative research on endocrine disrupters, a monitoring of DDT concentrations in the different food items eaten in nine European countries was carried out with a market-basket approach. Food of animal origin rich in fat are usually more contaminated than the vegetables, and Poland is generally the most polluted country. Even if the risk for the Polish population due to the exposure to pp'DDE seems to be quite low, it has to be taken into account that the contamination by DDT compounds did not significantly decrease in the last decade in Europe. The concentrations in human blood reflect the total concentration found in food of the different countries: in Poland where the contamination of food was really high in food, people presented an higher concentration of pp'DDE too [4,5,6].

Highlights

The knowledge of the levels measured in sentinel species or in food items is a useful and innovative approach which clearly demonstrate the potential risk of chronic effects both at the base and at the top of trophic chains.





Researches are carried out in strict collaboration with the Biology Department of the University of Milan

Relevant Publications


- [1] R.Bettinetti, C.Giarei, A.Provini, *Arch. Environ. Contam.*, **2003**, 45, 72.
- [2] R.Bettinetti, V.Croce, S.Galassi, *Water Air Soil Pollut.*, **2005**, 162, 385.
- [3] R.Bettinetti, V.Croce, S.Galassi, P.Volta, *Environ. Sci. Pollut. Res.* **2006**, 1, 59.
- [4] S.Galassi, R.Bettinetti, C.Neri, J.Falandysz, W.Kotecka, I.King, S.Lo, D.Klingmueller, **2006**, *COMPRENDO workshop, Frankfurt 16-18 March*.
- [5] S.Galassi, R.Bettinetti, M.C.Neri, R.Jeannot, T.Dagnac, S.Bristeau, V.Sakkas, T.Albanis, V.Boti, T.Valsamaki, J.Falandysz, U.Schulte-Oehlmann, **2006**, *Ecotox. Environ. Saf.*, in press.
- [6] J.Falandysz, T.Albanis, J.Bachmann, R.Bettinetti, I.Bochentin, V.Boti, S.Bristeau, B.Daehne, T.Dagnac, S.Galassi, R.Jeannot, J.Oehlmann, A.Orlikowska, V.Sakkas, T.Valsamaki, U.Schulte-Oehlmann, *J. Environ. Sci. Health*, **2006**, 41, in press.

PERSONALE DOCENTE AL 1 MARZO 2006

GRUPPO CHIMICO - Area Chimica Inorganica

GIROLAMO LA MONICA	Professore Ordinario – CHIM/03
	Sede: Via Valleggio Tel: 031-2386100 Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Generale (Fondamenti)
Direttore del Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali; Componente della Commissione di Ateneo per il Personale; Componente della Commissione Edilizia di Ateneo	
G.ATTILIO ARDIZZOIA	Professore Ordinario – CHIM/03
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386470 Corsi A.A. 2005-2006 Chimica dei Composti di Coordinazione I e II Chimica Generale (Complementi) Radiochimica e Chimica Nucleare
Direttore del Centro Grandi Attrezzature per lo Studio e la Caratterizzazione della Materia; Componente della Commissione Spazi del DSCA	
NORBERTO MASCIOCCHI	Professore Ordinario – CHIM/03
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326227 Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Inorganica – SC Strutturistica Chimica I e II – SC Laboratorio di Chimica Strutturale - SSC
Componente della Commissione per la Divulgazione Scientifica del DSCA; Editor della rivista <i>Powder Diffraction Journal</i>	
STEFANO TOLLARI	Professore Associato – CHIM/03
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386471 Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Generale ed Inorganica Chimica Inorganica Superiore


STEFANO BRENNÀ	Ricercatore Universitario – CHIM/03
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386476
	Corsi A.A. 2005-2006 Laboratorio di Chimica Generale e Inorganica


SIMONA GALLI	Ricercatore Universitario – CHIM/03
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326226
	Corsi A.A. 2005-2006 Chimica (per Fisica)

ANGELO MASPERO	Ricercatore Universitario – CHIM/03
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386472
	Corsi A.A. 2005-2006 Laboratorio di Chimica Generale e Inorganica Metodi Fisici in Chimica Inorganica

GRUPPO CHIMICO - Area Chimica Organica

GIOVANNI PALMISANO	Professore Ordinario – CHIM/06
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386234
	Corsi A.A. 2005-2006 Elementi di Chimica delle Macromolecole Complementi di Chimica Organica Elementi di Biochimica Chimica delle Sostanze Biologicamente Attive
Rappresentante dei Professori di I fascia nella Giunta del DSCA; Presidente del Consiglio Scientifico della Biblioteca di Scienze Como; Membro del Comitato Tecnico Scientifico per la Facoltà di Scienze di Como nel SiBA; Rappresentante dell'Ateneo nel Consiglio Direttivo del Consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli nei Sistemi Biologici	

GAETANO ZECCHI	Professore Ordinario – CHIM/04
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386441
	Corsi A.A. 2005-2006 Chimica e Chimica Industriale Chimica Organica Industriale Chimica e Tecnologia dei Polimeri Chimica Organica Superiore I modulo Laboratorio di Chimica Organica Industriale
Presidente CCD in Chimica e Chimica Industriale; Componente della Giunta della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. - Como	

TIZIANA BENINCORI	Professore Associato – CHIM/06
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 02-50314173
	Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Organica Chimica Organica Applicata

UMBERTO PIARULLI	Professore Associato – CHIM/06
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386444
	Corsi A.A. 2005-2006 Metodi Fisici in Chimica Organica I e II Sintesi e Tecniche Speciali Organiche
Componente del Comitato Tecnico-Scientifico del Centro Grandi Attrezzature (Como); Rappresentante dell'Ateneo nel Consorzio Interuniversitario "Reattività e Catalisi"	

MASSIMO SISTI	Professore Associato – CHIM/06
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386440
	Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Organica Elementi di Chimica delle Macromolecole Chimica Organica Superiore II modulo

GIANLUIGI BROGGINI	Ricercatore Universitario – CHIM/06
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386444
	Corsi A.A. 2005-2006 Chimica dei Composti Eterociclici I e II Laboratorio di Chimica Organica

ANDREA PENONI	Ricercatore Universitario – CHIM/06
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386440
	Corsi A.A. 2005-2006 Laboratorio di Chimica Organica Chimica Organica dell'Ambiente Laboratorio di Sintesi Organica
Rappresentante dei Ricercatori Universitari nella Giunta del DSCA	


GRUPPO CHIMICO - Area Chimica Analitica


CARLO DOSSI	Professore Ordinario – CHIM/01
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386451/6235
	Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Analitica Strumentale Tecniche Strumentali in Chimica Analitica Chimica dell'Ambiente con Laboratorio Laboratorio di Chimica Analitica Ambientale
Presidente CCD in Scienze Ambientali; Rappresentante dei Professori di I fascia nella Giunta del DSCA; Componente della Giunta della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. - Como	

SANDRO RECCHIA	Professore Associato – CHIM/01
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386450/6452
	Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Analitica Chimica Analitica degli Inquinanti Laboratorio di Analisi Strumentale





ANDREA POZZI	Professore Associato – CHIM/01
	<p>Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386442</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Analitica dei Materiali I e II Chimica dell'Ambiente con Laboratorio Chimica Analitica Ambientale Chemimetria Metodologie Trattamento Dati Ambientali</p>
<p>Delegato del Rettore per l'Attività Sportiva degli Studenti; Membro del Consiglio di Amministrazione; Responsabile e-learning per i corsi di Docente di Chimica dell'Ambiente con Laboratorio; Responsabile per i Corsi di Laurea Ambientali delle attività sul territorio (stage ambientali); Membro Commissione Spazi del DSCA; Membro della Giunta del DSCA</p>	

BARBARA GIUSSANI	Ricercatore Universitario – CHIM/01
	<p>Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386424/6451</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Laboratorio di Chimica Analitica Chemimetria</p>

DAMIANO MONTICELLI	Ricercatore Universitario – CHIM/01
	<p>Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-6427</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Analitica con Laboratorio Chimica dell'Ambiente con Laboratorio Chimica Analitica Superiore - II modulo</p>

LAURA RAMPAZZI	Ricercatore Universitario – CHIM/01
	<p>Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386475</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Analitica Chimica dei Beni Culturali Chimica Analitica dei Materiali I e II</p>

GRUPPO CHIMICO – Area Chimica Fisica

<p>ALDO GAMBA</p>	<p>Professore Ordinario – CHIM/02</p>
	<p>Sede: Via Lucini Sede: Via Valleggio Tel: 031-326219 Tel: 031-2386000</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Fisica Chimica Fisica Industriale Chimica Fisica dell'Ambiente</p>
<p>Preside della Facoltà di Scienze MM.FF.NN sede di Como dell'Università dell'Insubria; Componente della Commissione per le Risorse di Ateneo; Componente della Commissione di Ateneo per la Ricerca Scientifica; Direttore del “Centro di Calcolo Scientifico di Ateneo”</p>	
<p>GABRIELE MOROSI</p>	<p>Professore Ordinario – CHIM/02</p>
	<p>Sede: Via Lucini Tel: 031-326234</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Complementi di Chimica Fisica Chimica Teorica Spettroscopia Molecolare</p>
<p>Coordinatore del Dottorato di Scienze Chimiche</p>	
<p>GIORGINA CORONGIU</p>	<p>Professore Associato – CHIM/02</p>
	<p>Sede: Via Lucini Tel: 031-326223</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Meccanica Molecolare Chimica Quantistica Chimica Fisica Computazionale</p>
<p>Rappresentante dei Professori di II fascia in Senato Accademico</p>	
<p>ETTORE FOIS</p>	<p>Professore Associato – CHIM/02</p>
	<p>Sede: Via Lucini Tel: 031-326218</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Chimica Fisica Chimica Fisica del Colore Chimica Fisica degli Stati Condensati</p>

DARIO BRESSANINI	Ricercatore Universitario – CHIM/02
	<p>Sede: Via Lucini Tel: 031-326225</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Termodinamica Chimica Programmazione e Simulazione Dinamica delle Reazioni Molecolari</p>

GLORIA TABACCHI	Ricercatore Universitario – CHIM/02
	<p>Sede: Via Lucini Tel: 031-326214</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Principi Molecolari dell'Elettronica Nanomateriali</p>

GRUPPO AMBIENTALE - Area Geologia


SILVANA MARTIN	Professore Ordinario – GEO/03
	<p>Sede: Via Lucini Tel: 031-326212</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Geologia e Laboratorio di Litologia Analisi del Rischio Geologico Ambientale con Laboratorio Geologia Strutturale Applicata</p>

ALESSANDRO MICHETTI	Professore Associato – GEO/03
	<p>Sede: Via Lucini Tel: 031-326231</p> <p>Corsi A.A. 2005-2006 Laboratorio di Geologia Morfogenesi e Stratigrafia dell'Olocene con Laboratorio Telerilevamento e Fotointerpretazione</p>
Componente della Commissione per la Divulgazione Scientifica del DSCA	

LUIGINA VEZZOLI	Professore Associato – GEO/08
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326239 Corsi A.A. 2005-2006 Geochimica Limnogeologia Vulcanologia Ambientale
Componente della Commissione Spazi del DSCA; Rappresentante dei Professori di II fascia nella Giunta del DSCA	

FEDERICO PASQUARE'	Ricercatore Universitario – GEO/03
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326238 Corsi A.A. 2005-2006 Geografia e Laboratorio di Cartografia Comunicazione Ambientale con Laboratorio

GRUPPO AMBIENTALE - Area Biologica

DONATO CHIATANTE	Professore Ordinario –BIO/03
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326213 Corsi A.A. 2005-2006 Biologia Vegetale Botanica per i Beni Culturali Biologia Generale II Botanica Ambientale e Applicata
Vice-Direttore del Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali; Coordinatore del Dottorato in Scienze Ambientali	


ANTONIO DI GUARDO	Professore Associato –BIO/07
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-3266480 Corsi A.A. 2005-2006 Ecologia Generale ed Applicata Laboratorio di Ecotossicologia Ecotossicologia
Componente del Comitato Tecnico Scientifico del Centro Grandi Attrezzature (Como)	

ELISABETTA ZANARDINI	Professore Associato – AGR/16
	Sede: Via Lucini Tel. 031 326221
	Corsi A.A. 2005-2006 Microbiologia con Laboratorio - SA Microbiologia Ambientale con Laboratorio SSA
Referente di Facoltà Servizio Studenti Disabili	

ROBERTA BETTINETTI	Ricercatore Universitario –BIO/07
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386481
	Corsi A.A. 2005-2006 Laboratorio di Ecologia Ecologia delle Acque Interne Biolimnologia

ANTONINO DI IORIO	Ricercatore Universitario –BIO/03
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326239
	Corsi A.A. 2005-2006 Fitogeografia

GRUPPO AMBIENTALE - Area Culturale

FRANCESCO CAMPIONE	Ricercatore Universitario – M-DEA/01
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326204
	Corsi A.A. 2005-2006 Antropologia Culturale Educazione Ambientale


GRUPPO AMBIENTALE - Area Medica


GIANFRANCO PERUZZO	Professore Associato – MED/44
	Sede: Via Lucini Tel: 031-238239
Componente della Commissione Spazi del DSCA	

DOMENICO CAVALLO	Ricercatore Universitario – MED/44
	Sede: Via Lucini Tel: 031-326239 Corsi A.A. 2005-2006 Igiene Industriale Igiene Industriale applicata con Laboratorio
Rappresentante dei Ricercatori Universitari nella Giunta del DSCA	


PERSONALE TECNICO – AMMINISTRATIVO AL 1 MARZO 2006

Rosario CUMBO	Area Amministrativa
	Sede: Via Valleggio Tel: 031-2386111
Segretario Amministrativo del Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali	

Carmela BARONE	Area Amministrativa
	Sede: Via Valleggio Tel: 031-2386114


Enrica ALBERTI	Area Tecnica
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386430

Davide BISCIONI	Area Tecnica
	Sede: Via Lucini Tel: 031-3261


Francesca PARASSOLE	Area Tecnica
	Sede: Via Valleggio Tel: 031-2386113


Angelo GIROLA	Area Tecnica
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386430


Responsabile del Servizio NMR; Membro del Comitato Tecnico Scientifico del Centro Grandi Attrezzature (Como)

Sonia MOSCONI	Area Tecnica
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386421

Responsabile servizio Analisi Elementare CHN e di Analisi Termiche

Mario ORIANI	Area Tecnica
	Sede: Via Lucini Tel: 031.326232

Rossella PERNA	Area Tecnica
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386420
Responsabile coordinamento ed organizzazione laboratori didattici sperimentali del settore chimico ed ambientale; Rappresentante del Personale Tecnico Amministrativo nel Consiglio del DSCA; Rappresentante del Personale Tecnico Amministrativo nella Giunta del DSCA; Rappresentante del Personale Tecnico Amministrativo in Senato Accademico	

Patrizia SCUDERI	Area Tecnica
	Sede: Via Castelnuovo Tel: 031-2386425
Responsabile gestione rifiuti speciali (tossico-nocivi); Rappresentante del Personale Tecnico Amministrativo nel Consiglio del DSCA; Rappresentante del Personale Tecnico Amministrativo nella Giunta del DSCA; Componente del Comitato per le Pari Opportunità dell'Università.	

Personale Tecnico di Area Amministrativa

La Segreteria Amministrativa del DSCA si occupa della gestione amministrativa e contabile del Dipartimento, che ha autonomia di bilancio ed una propria capacità autonoma di spesa.

In particolare, essa si occupa di:

- Acquisizione di beni e servizi, per attività didattiche, di ricerca e di gestione;
- Gestione economica di missioni e compensi vari;
- Redazione e cura di verbali, delibere e decreti del Direttore o del Consiglio di Dipartimento;
- Archivio di documentazione giuridica, amministrativa ed economica;
- Contatti con il Tesoriere dell'Ateneo;
- Gestione di contratti di consulenza e di prestazioni in conto terzi;
- Gestione delle entrate e loro ripartizione;
- Bilancio (previsone, redazione e rendicontazione).

Attualmente localizzato nell'edificio universitario di via Valleggio, il personale tecnico di Area Amministrativa è coordinato dal Segretario Amministrativo, Sig. Rosario Cumbo, che si avvale anche della preziosa collaborazione di personale di Dipartimenti Affini.

Personale Tecnico di Area Chimica

Al Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali dell'Università degli Studi dell'Insubria afferiscono i laboratori didattici di area chimica e ambientale della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Como. Il personale tecnico, addetto all'organizzazione ed alla gestione di questi laboratori, è responsabile della manutenzione ordinaria delle attrezzature, provvede alla tenuta dell'inventario di magazzino e assicura la necessaria assistenza tecnica durante lo svolgimento delle esercitazioni.

Su tale personale gravano inoltre i seguenti incarichi:

- utilizzo e gestione di strumenti impiegati per attività di didattica e di ricerca in ambito chimico ed ambientale e per prestazioni in conto terzi, in cooperazione con il Centro Servizi e Grandi Attrezzature per lo Studio e la Caratterizzazione della Materia.
- assistenza alle esercitazioni di carattere Chimico-Ambientale "sul campo", per i Corsi di Laurea in Scienze Ambientali.
- tenuta del registro di carico e scarico dei rifiuti tossico-nocivi, compilazione della scheda di rilevamento annuale di ogni tipologia di rifiuto, rispetto degli adempimenti di legge c/o UTF per l'uso di idrocarburi e alcoli.

Personale Tecnico di Area Ambientale

Il Personale Tecnico di Scienze Ambientali si occupa della gestione e manutenzione di strumentazioni stanziali e mobili per il laboratorio idoneo alla didattica e alla ricerca di tipo geologico, chimico, biologico, sia di tipo animale che vegetale. Offre supporto alle attività di didattica in laboratori di campagna con competenze interdisciplinari per lo studio e la gestione di sistemi complessi, considerandone anche le funzioni ed interazioni di ordine sociale ed economico legate allo sviluppo al rischio ed alla tutela ambientale.

Il Laboratorio di Spettroscopia NMR

Il laboratorio di spettroscopia NMR è situato presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali dell'Università dell'Insubria ed afferisce al Centro Servizi e Grandi Attrezzature per lo Studio e la Caratterizzazione della Materia. Il laboratorio è equipaggiato con uno spettrometro Bruker AVANCE 400 MHz ultrashield che ha in dotazione i seguenti apparati:

- sonda di alta risoluzione, 5mm BBO-BB-1H-D Z GRD
- sonda per stato solido, 4mm CPMAS
- sonda microimmagine, 5mm

Gli esperimenti NMR di alta risoluzione includono l'acquisizione di spettri mono-dimensionali di protoni ed eteronuclei (^{13}C , ^{31}P , ecc.), esperimenti bi-dimensionali omonucleari ed eteronucleari (COSY, HSQC, HMQC, ecc.), studi NMR a temperature variabili. Gli esperimenti allo stato solido includono l'acquisizione di spettri con disaccoppiamento ad alta potenza e di cross-polarization con magic angle spinning (CPMAS) di carbonio e altri eteronuclei (^{31}P , ^{29}Si , ecc.).

Lo spettrometro viene attualmente impiegato per attività di ricerca nel campo della chimica organica, inorganica, organometallica, per attività didattica e per contratti con Aziende esterne.

Il laboratorio fornisce inoltre consulenze e prestazioni in conto terzi in diverse aree: chimica, chimica farmaceutica, polimeri, materiali.

Personale Tecnico di Area Informatica

Il personale tecnico informatico del DSCA, allocato nella sede di via Lucini, ma responsabile anche delle attrezzature informatiche di uffici e laboratori di via Castelnuovo, offre i seguenti servizi:

- gestione dei sistemi di posta elettronica e dei siti web di Dipartimento e di Facoltà (scienze-como.uninsubria.it), dei sistemi di stampa, nonché della connettività della sede di via Lucini col resto dell'ateneo, con implementazione delle policy di sicurezza locali (sistemi di firewalling).
- gestione del cluster di macchine Unix (circa una quarantina), utilizzate principalmente per il calcolo scientifico, e dei sistemi Windows appartenenti agli afferenti al Dipartimento; il supporto ai sistemi viene fornito sia dal punto di vista hardware che software.
- gestione dei sistemi HPC (cluster per calcolo ad alte prestazioni) attualmente ospitati nel Centro di calcolo Scientifico di via Lucini.
- manutenzione hardware e software di due aule informatiche: una in via Castelnuovo (dotata di 15 calcolatori dual-boot Linux e Windows XP, e del server Unix che gestisce sia via Castelnuovo che via Valleggio), l'altra in via Lucini (dotata di una quindicina di postazioni Unix/Windows e di un plotter HP ad alta risoluzione).

Il Centro di Calcolo Scientifico

All'inizio del 2006 è stato istituito presso l'Università dell'Insubria il Centro di Calcolo Scientifico, la cui gestione amministrativa è stata affidata al DSCA. Tale Centro persegue le seguenti finalità:

- promuove attività di ricerca di base e applicata nell'ambito delle scienze esatte;
- promuove il calcolo scientifico nelle diverse aree disciplinari;
- favorisce l'interscambio di risultati e tecnologie con le comunità scientifiche di riferimento;
- favorisce il trasferimento di risultati e competenze tra ricercatori di aree e discipline diverse;
- favorisce il trasferimento di risultati verso Enti ed Organizzazioni del comparto produttivo.

Attualmente ospitato nei locali di via Lucini, il Centro di Calcolo Scientifico è diretto dal Prof. Aldo Gamba.

ASSEGNISTI DI RICERCA AL 1 MARZO 2006

Nome e Cognome	Sede dei Laboratori	Tutor
Fulvio Castelli	Via Castelnuovo	Prof. Ardizzoia
Andrea Cattaneo	Via Lucini	Dott. Cavallo
Cono Di Paola	Via Lucini	Prof. Morosi
Daniela Fanetti	Via Lucini	Prof.ssa Vezzoli
Roberto Gambillara	Via Lucini	Prof.ssa Martin
Simona Losio	Via Castelnuovo	Prof. Zecchi
Carlo Peruzzo	Via Lucini	Dott. Cavallo
Sabina Rossi	Via Lucini	Prof.ssa Vezzoli
Matteo Taronna	Via Lucini	Dott. Cavallo
Simone Tumiatei	Via Lucini	Prof.ssa Martin

Il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche

Il "Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche" offre un approccio multidisciplinare alla ricerca chimica al fine di fornire al dottorando le basi necessarie per l'individuazione della problematica scientifica e per l'impostazione e lo svolgimento della propria attività di ricerca. Tale attività viene svolta anche con periodi di soggiorno all'estero presso qualificati laboratori di ricerca. Le modalità di svolgimento del corso ed i relativi programmi formativi sono flessibili e organizzati individualmente, basati sulla partecipazione ad attività di tipo seminariale, a cicli di lezioni monotematiche, a corsi specialistici e a scuole nazionali. In particolare sono stati recentemente organizzati corsi specialistici tenuti da docenti stranieri: "Non-Equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures, Chaos and Fractals" (Prof. André), "Quantum Theory of Polymers" (Prof. André) e "Solid State NMR as a Powerful Method in Chemistry" (Prof.ssa Blümel).

L'attività del dottorato ha visto sinora la conclusione di 4 cicli (XV-XVIII): 9 sono gli studenti che hanno conseguito il titolo di Dottore di Ricerca. Attualmente sono attivi i cicli XIX, XX e XXI, ai quali sono iscritti rispettivamente 3, 6 e 8 studenti. Per ognuno dei cicli sono state assegnate 2 borse da parte dell'Insubria. La validità del progetto di dottorato è inoltre testimoniata dall'ottenimento di 3 Borse che fanno riferimento al "Progetto Giovani" finanziato direttamente dal MIUR:

- XX ciclo: 1 borsa nell'ambito di indagine prioritario "Processi chimici innovativi".
- XXI ciclo: 2 borse negli ambiti di indagine prioritari "Processi chimici innovativi" e "Micro- e nano-tecnologie".

Risultano inoltre iscritte al XXI ciclo anche 2 studentesse straniere con borse "Pierre e Marie Curie" finanziate dalla Comunità Europea.

DOTTORANDI DI SCIENZE CHIMICHE AL 1 MARZO 2006

Nome e Cognome	Sede dei Laboratori	Ciclo	Tutor
Andrea Credaro	Via Castelnuovo	XIX	Prof. Pozzi
Ivan De Marchi	Via Castelnuovo	XIX	Dott. Broggin
Silvia Macecchini	Via Lucini	XIX	Prof. Morosi
Alessandro Calizzi	Via Castelnuovo	XX	Prof. Tollari
Davide Gianni	Via Lucini	XX	Prof. Masciocchi
Chiara Marelli	Via Castelnuovo	XX	Prof. Piarulli
Michela Martinelli	Via Castelnuovo	XX	Dott. Broggin
Cinzia Medici	Via Lucini	XX	Prof. Fois
Federico Rusconi	Via Castelnuovo	XX	Prof. Zecchi
Gabriele Carugati	Via Castelnuovo	XXI	Prof. Pozzi
Francesca Colombo	Via Castelnuovo	XXI	Prof. Palmisano
Marcello Marelli	Via Castelnuovo	XXI	Prof. Pozzi
Alessandro Mondelli	Via Castelnuovo	XXI	Prof. Palmisano
Marta Patrone	Via Lucini	XXI	Prof. Morosi
Silvia Sottocornola	Via Castelnuovo	XXI	Dott. Broggin

Il Dottorato di Ricerca in Scienze Ambientali

Il Dottorato in Scienze Ambientali prende in considerazione un ampio spettro di problematiche ambientali dalla geologia e prevenzione dei rischi idrogeologici, agli aspetti della qualità dell'aria e delle acque in ambienti naturali e in ambienti di lavoro, a ricerche di tipo metodologico per il controllo, la gestione e il recupero ambientale. L'attività di ricerca si avvale di collaborazioni con l'ANPA (Agenzia Nazionale Protezione Ambientale) e l'INRM (Istituto Nazionale per la Ricerca Scientifica e tecnologica sulla Montagna), con il Comune di Como, la Regione Lombardia, l'ARPA Lombardia e la Comunità Montana del Triangolo Lariano. Per quanto concerne più dettagliatamente le ricerche oggetto di studio da parte dei dottorandi, occorre sottolineare che nel campo geologico la ricerca é mirata:

- ad analizzare e definire i fattori geologici, idrologici, climatici e morfogenetici di modellamento del paesaggio con la finalità di comprendere la vulnerabilità dell'ambiente fisico;
- a portare all'acquisizione di una buona conoscenza del territorio, delle sue caratteristiche meccaniche e quindi del suo comportamento di fronte ad eventi climatici e meccanici repentini e catastrofici. Su questi aspetti si innestano anche ricerche di comunicazione in merito a temi e problematiche ambientali.

Un filone di ricerche attivo in questo dottorato riguarda anche lo studio dei fattori di rischio ambientale derivanti dall'attività industriale. Ci si prefigge di individuare, valutare e controllare, ai fini della prevenzione e della eventuale bonifica dei fattori ambientali di natura chimica o fisica derivanti dall'attività industriale, presenti all'interno ed all'esterno degli ambienti di lavoro, che possono alterare lo stato di salute e di benessere dei lavoratori e della popolazione.

Per quanto concerne lo studio di acque superficiali, ghiaccio e sedimenti nelle aree montane e lacustri, la ricerca utilizza differenti metodologie analitiche per raggiungere due scopi primari: da un lato permettere di analizzare i campioni contemporaneamente sia in laboratorio che sul campo con strumentazioni portatili, e dall'altro di combinare più tecniche in parallelo per minimizzare eventuali interferenze analita/matrice.

Negli ultimi anni, nell'ambito di questo dottorato, sono stati avviati studi di fenomeni di erosione del suolo sia per quanto concerne la componente vegetazione che per quanto concerne l'evoluzione che gli eventi franosi degli ultimi 50 anni hanno determinato, in coincidenza con i cambiamenti climatici avvenuti. Obiettivi specifici di questa ricerca sono la comprensione del ruolo e del meccanismo attraverso il quale le piante rinforzano il suolo e

quindi rinforzano la stabilità dei versanti, la valutazione della dipendenza tra tipo di gestione del bosco e stabilità dei versanti; la valutazione della funzionalità delle specie presenti nei siti in rapporto alle loro caratteristiche di radicazione e confronto con la eventuale funzionalità delle specie suggerite dall'analisi della vegetazione potenziale.

Le attività di ricerca dei dottorandi sono spesso condotte presso laboratori stranieri nell'ambito di collaborazioni stabilite tra i componenti del Collegio docenti con numerosi colleghi stranieri. Questo stato di internazionalizzazione del dottorato è testimoniato da un numero considerevole di dottorati in cotutela già svolti o in svolgimento con diversi laboratori di ricerca siti presso l'Università Parigi VII "Diderot". Significativo è anche il successo di questo dottorato nell'ottenere borse di studio nell'ambito di programmi di ricerca destinati a studi di tecnologie innovative per lo studio dell'ambiente finanziati dal MIUR. Di buon livello è anche la formazione didattica dei dottorandi ed il numero di pubblicazioni prodotte.

DOTTORANDI DI SCIENZE AMBIENTALI AL 1 MARZO 2006

Nome e Cognome	Sede dei Laboratori	Ciclo	Tutor
Guido Brusa	Via Lucini	XIX	Prof. Chiatante
Elena Ciceri	Via Castelnuovo	XIX	Prof. Recchia
Antonio Montagnoli	Via Lucini	XIX	Prof. Chiatante
Giancanio Sileo	Via Lucini	XIX	Prof. Michetti
Andrea Uttini	Via Lucini	XIX	Prof.ssa Vezzoli
Elisa Buraschi	Via Lucini	XX	Prof. Chiatante
Sabrina Cappelletti	Via Lucini	XX	Prof. Michetti
Antonella Centurini	Via Lucini	XX	Prof.ssa Martin
Alfonso Infantino	Via Castelnuovo	XX	Prof. Di Guardo
Franz Livio	Via Lucini	XX	Prof. Michetti
Kervin Chunga	Via Lucini	XXI	Prof. Michetti
Gaetano Garramone	Via Lucini	XXI	Dott. Cavallo
Elisa Lietti	Via Lucini	XXI	Prof. Morosi
Sila Motella	Via Lucini	XXI	Prof. Michetti
Alfio Viganò	Via Lucini	XXI	Prof.ssa Martin

PUBBLICAZIONI A STAMPA (ISI): BIENNIO 2004-2005

1. Bressanini, D, Morosi, G, Tarasco, S, An investigation of nodal structures and the construction of trial wave functions, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, NOV 22, 2005, 123, 20, 204109, ISI:000233661000011
2. Masciocchi, N, Rigamonti, C, Maspero, A, Poly[di-mu(3)-hydroxy-methanesulfinato-zinc(II)], ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION E-STRUCTURE REPORTS ONLINE, DEC, 2005, 61, Part 12, M2683, M2685, ISI:000233656200098
3. Ploger, A, Fischer, E, Nirmaier, HP, Laglera, LM, Monticelli, D, van den Berg, CMG, Lead and copper speciation in remote mountain lakes, LIMNOLOGY AND OCEANOGRAPHY, MAY, 2005, 50, 3, 995, 1010, ISI:000229243700024
4. Michetti, AM, Audemard, FA, Marco, S, Future trends in paleoseismology: Integrated study of the seismic landscape as a vital tool in seismic hazard analyses, TECTONOPHYSICS, OCT 28, 2005, 408, 1-4, 3, 21, ISI:000233449300002
5. Aime, S, Gianolio, E, Longo, D, Pagliarin, R, Lovazzano, C, Sisti, M, New insights for pursuing high relaxivity MRI agents from modelling the binding interaction of Gd-III chelates to HSA, CHEMBIOCHEM, MAY, 2005, 6, 5, 818, +, ISI:000229171800007
6. Papanikolaou, LD, Roberts, GP, Michetti, AM, Fault scarps and deformation rates in Lazio-Abruzzo, Central Italy: Comparison between geological fault slip-rate and GPS data, TECTONOPHYSICS, OCT 28, 2005, 408, 1-4, 147, 176, ISI:000233449300010
7. Monti, C, Gennari, C, Piarulli, U, de Vries, JG, de Vries, AHM, Lefort, L, Rh-catalyzed asymmetric hydrogenation of prochiral olefins with a dynamic library of chiral TROPOS phosphorus ligands, CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, NOV 4, 2005, 11, 22, 6701, 6717, ISI:000233293100026
8. Rodriguez, A, Sakiyama, H, Masciocchi, N, Galli, S, Galvez, N, Lloret, F, Colacio, E, Hexacyanocobaltate(III) anions as precursors of Co(II)-Ni(II) cyano-bridged multidimensional assemblies: Hydrothermal syntheses,, crystal and powder x-ray structures and magnetic properties, INORGANIC CHEMISTRY, NOV 14, 2005, 44, 23, 8399, 8406, ISI:000233180600034
9. Abbiati, G, Beccalli, EM, Broggin, G, Paladino, G, Rossi, E, A valuable synthesis of pyrrolo[1,2-alpha]quinoxalines, indolo[1,2-alpha]-quinoxalines and their aza-analogues by palladium-catalyzed intramolecular carbon-nitrogen bond formation, SYNTHESIS-STUTTGART, NOV 3, 2005, 17, 2881, 2886, ISI:000233077500013
10. Clementi, E, Corongiu, G, Comments on computational chemistry: From diatomic molecules to large biochemical systems, INTERNATIONAL

- JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, DEC 20, 2005, 105, 6, 709, 730, ISI:000233063100018
11. Corongiu, G, HF-HL method: Combination of Hartree-Fock and Heitler-London approximations, INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, DEC 20, 2005, 105, 6, 831, 838, ISI:000233063100032
 12. Casellas, N, Gamez, P, Reedijk, J, Mutikainen, I, Turpeinen, U, Masciocchi, N, Galli, S, Sironi, A, Moisture-triggered 1,3,5-triazine-based Cu(II) molecular switch: A combined X-ray single-crystal and powder diffraction study, INORGANIC CHEMISTRY, OCT 31, 2005, 44, 22, 7918, 7924, ISI:000232898800029
 13. Monti, C, Gennari, C, Piarulli, U, Enantioselective conjugate addition of phenylboronic acid to enones, catalysed by a chiral tropos/atropos rhodium complex at the coalescence temperature, CHEMICAL COMMUNICATIONS, 2005, 42, 5281, 5283, ISI:000232799900009
 14. Monticelli, D, Psaro, R, Pozzi, A, Dossi, C, Recchia, S, Differential pulse voltammetric determination of tin in the presence of noble metals, ANALYTICAL AND BIOANALYTICAL CHEMISTRY, SEP, 2005, 383, 1, 115, 121, ISI:000232952600016
 15. Chiatante, D, Di Iorio, A, Scippa, GS, Root responses of Quercus ilex L. seedlings to drought and fire, PLANT BIOSYSTEMS, JUL, 2005, 139, 2, 198, 208, ISI:000232727800010
 16. Masciocchi, N, Sironi, A, Structural powder diffraction characterization of organometallic species: the role of complementary information, COMPTES RENDUS CHIMIE, SEP-OCT, 2005, 8, 9-10, 1617, 1630, ISI:000232484200028
 17. Bressanini, D, Reynolds, PJ, Unexpected symmetry in the nodal structure of the He atom, PHYSICAL REVIEW LETTERS, SEP 9, 2005, 95, 11, 110201, ISI:000231802000001
 18. Bashilov, VV, Dolgushin, FM, Petrovskii, PV, Sokolov, VI, Sada, M, Benincori, T, Zotti, G, Synthesis and structure of the chiral palladium-fullerene C-60 and C-70 complexes with enantiomeric ligand 2,2',5,5'-tetramethyl-4,4'-bis(diphenylphosphino)-3,3'-bithiophene [(-)tetraMe-BITIOP], JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, OCT 1, 2005, 690, 19, 4330, 4336, ISI:000231939900014
 19. Benaglia, M, Benincori, T, Mussini, P, Pilati, T, Rizzo, S, Sanniccolo, F, Steric and electronic tuning of chiral bis(oxazoline) ligands with 3,3'-bithiophene backbone, JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, SEP 16, 2005, 70, 19, 7488, 7495, ISI:000231859000005
 20. Fois, E, Gamba, A, Medici, C, Tabacchi, G, Intermolecular electronic excitation transfer in a confined space: A first-principles study, CHEMPHYSICHEM, SEP 5, 2005, 6, 9, 1917, 1922, ISI:000231971100046
 21. Galli, S, Masciocchi, N, Cariati, E, Sironi, A, Barea, E, Haj, MA, Navarro, JAR, Salas, JM, Quest for second-harmonic-generation-active

- coordination polymers: Synthesis and properties of silver(I) pyrimidinolates, CHEMISTRY OF MATERIALS, SEP 20, 2005, 17, 19, 4815, 4824, ISI:000231894600010
22. Brogini, G, De Marchi, I, Martinelli, M, Paladino, G, Pilati, T, Terraneo, A, Effective synthesis of enantiopure [1,2,3]triazolo[1,5-a]- and pyrazolo[1,5-a]pyrrolo[2,1-c][1,4]benzodiazepines by diastereoselective intramolecular azide and nitrilimine cycloadditions, SYNTHESIS-STUTTGART, AUG 19, 2005, 13, 2246, 2252, ISI:000231458200025
 23. Navarro, JAR, Barea, E, Galindo, MA, Salas, JM, Romero, MA, Quiros, M, Masciocchi, N, Galli, S, Sironi, A, Lippert, B, Soft functional polynuclear coordination compounds containing pyrimidine bridges, JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY, AUG, 2005, 178, 8, 2436, 2451, ISI:000231634000006
 24. Tabacchi, G, Hutter, J, Mundy, CJ, A density-functional approach to polarizable models: A Kim-Gordon response density interaction potential for molecular simulations, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, AUG 15, 2005, 123, 7, 074108, ISI:000231449700008
 25. Fois, E, Gamba, A, Tabacchi, G, Quartieri, S, Arletti, R, Vezzalini, G, High-pressure behaviour of yugawaralite at different water content: an ab initio study, OXIDE BASED MATERIALS: NEW SOURCES, NOVEL PHASES, NEW APPLICATIONS, STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS, 2005, 155, 271, 280, ISI:000230940100023
 26. Tubino, R, Fois, E, Gamba, A, Macchi, G, Meinardi, F, Minoia, A, Conjugated molecules in nanochannels: nanoengineering for optoelectronics, OXIDE BASED MATERIALS: NEW SOURCES, NOVEL PHASES, NEW APPLICATIONS, STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS, 2005, 155, 501, 510, ISI:000230940100045
 27. Losio, S, Zecchi, G, Bertini, F, Sacchi, MC, Bertolasi, V, Polo, E, Unbridged zirconium and titanium metallocenes with seven- or eight-saturated fused-ring ligands: a route for the synthesis of stereoblock polypropene, MACROMOLECULES, AUG 23, 2005, 38, 17, 7231, 7240, ISI:000231274100008
 28. Benincori, T, Bruno, S, Celentano, G, Pilati, T, Ponti, A, Rizzo, S, Sada, M, Sannicolo, F, Process-scale total synthesis of nature-identical (-)-(S,S)-7-hydroxycalamenal in high enantiomeric purity through catalytic enantioselective hydrogenation, HELVETICA CHIMICA ACTA, 2005, 88, 7, 1776, 1789, ISI:000231027700012
 29. Fois, E, Gamba, A, Tabacchi, G, Electronic spectra of Ti(IV) in zeolites: An ab initio approach, CHEMPHYSICHEM, JUL 11, 2005, 6, 7, 1237, 1239, ISI:000230521900004
 30. Benincori, T, Pilati, T, Rizzo, S, Sannicolo, F, Burk, MJ, de Ferra, L, Ullucci, E, Piccolo, O, 2,5-dimethyl-3,4-bis[(2R,5R)-2,5-dimethylphospholano]thiophene: First member of the hetero-DuPHOS

- family, JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, JUL 8, 2005, 70, 14, 5436, 5441, ISI:000230355200011
31. Tumiati, S, Godard, G, Martin, S, Nims, P, Mair, V, Boyer, B, Dissakisite-(La) from the Ulten zone peridotite (Italian Eastern Alps): A new end-member of the epidote group, AMERICAN MINERALOGIST, JUL, 2005, 90, 7, 1177, 1185, ISI:000230414500019
 32. Tamasi, E, Stokes, A, Lasserre, B, Danjon, F, Berthier, S, Fourcaud, T, Chiatante, D, Influence of wind loading on root system development and architecture in oak (*Quercus robur* L.) seedlings., TREES-STRUCTURE AND FUNCTION, JUN, 2005, 19, 4, 374, 384, ISI:000229890700003
 33. Masciocchi, N, Galli, S, Sironi, A, X-ray powder diffraction characterization of polymeric metal diazulates, COMMENTS ON INORGANIC CHEMISTRY, 2005, 26, 1-2, 1, 37, ISI:000230002500001
 34. Farmer, PB, Kaur, B, Roach, J, Levy, L, Consonni, D, Bertazzi, PA, Pesatori, A, Fustinoni, S, Buratti, M, Bonzini, M, Colombi, A, Popov, T, Cavallo, D, Desideri, A, Valerio, F, Pala, M, Bolognesi, C, Merlo, F, The use of S-phenylmercapturic acid as a biomarker in molecular epidemiology studies of benzene, CHEMICO-BIOLOGICAL INTERACTIONS, MAY 30, 2005, 153, Sp. Iss. SI, 97, 102, ISI:000230065500011
 35. Tumiati, S, Casartelli, P, Mambretti, A, Martin, S, Frizzo, P, Rottoli, M, The ancient mine of servette (Saint-Marcel, Val d'Aosta, western, Italian Alps): A mineralogical, metallurgical and charcoal analysis of furnace slags, ARCHAEOOMETRY, MAY, 2005, 47, Part 2, 317, 340, ISI:000229975400009
 36. Dal Santo, V, Dossi, C, Fusi, A, Psaro, R, Mondelli, C, Recchia, S, Fast transient infrared studies in material science: development of a novel low dead-volume, high temperature DRIFTS cell, TALANTA, APR 30, 2005, 66, 3, 674, 682, ISI:000229812200022
 37. Bettinetti, R, Croce, V, Galassi, S, Ecological risk assessment for the recent case of DDT pollution in Lake Maggiore (Northern Italy), WATER AIR AND SOIL POLLUTION, MAR, 2005, 162, 1-4, 385, 399, ISI:000229510200024
 38. Malusa, MG, Polino, R, Zattin, M, Bigazzi, G, Martin, S, Piana, F, Miocene to Present differential exhumation in the Western Alps: Insights from fission track thermochronology, TECTONICS, MAY 21, 2005, 24, 3, TC3004, ISI:000229588400001
 39. Realini, M, Colombo, C, Sansonetti, A, Rampazzi, L, Colombini, MP, Bonaduce, I, Zanardini, E, Abbruscato, P, Oxalate films and red stains on Carrara marble, ANNALI DI CHIMICA, MAR-APR, 2005, 95, 3-4, 217, 226, ISI:000229560800013
 40. Beccalli, EM, Broggin, G, Martinelli, M, Paladino, G, Zoni, C, Synthesis of tricyclic quinolones and naphthyridones by intramolecular

- heck cyclization of functionalized electron-rich heterocycles, EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, MAY 13, 2005, 10, 2091, 2096, ISI:000229363600016
41. Aime, S, Gianolio, E, Longo, D, Pagliarin, R, Lovazzano, C, Sisti, M, New insights for pursuing high relaxivity MRI agents from modelling the binding interaction of Gd-III chelates to HSA, CHEMBIOCHEM, MAY, 2005, 6, 5, 818, +, ISI:000229171800007
 42. Malpezzi, L, Magnone, GA, Masciocchi, N, Sironi, A, Single crystal and powder diffraction characterization of three polymorphic forms of Acitretin, JOURNAL OF PHARMACEUTICAL SCIENCES, MAY, 2005, 94, 5, 1067, 1078, ISI:000228792200015
 43. Cingolani, A, Galli, S, Masciocchi, N, Pandolfo, L, Pettinari, C, Sironi, A, Sorption-desorption behavior of bispyrazolato-copper(II) 1D coordination polymers, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, MAY 4, 2005, 127, 17, 6144, 6145, ISI:000228755300004
 44. Pettinari, C, Masciocchi, N, Third EuChem Conference on "Nitrogen ligands in organometallic chemistry and homogeneous catalysis", Camerino, Italy, September 2004. Classical organometallic chemistry and beyond, JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, APR 15, 2005, 690, 8, 1871, 1877, ISI:000228788500001
 45. Cravotto, G, Demartin, F, Palmisano, G, Penoni, A, Radice, T, Tollari, S, Novel cyclometallated Pd(II) and Pt(II) complexes with indole derivatives and their use as catalysts in heck reaction, JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, APR 15, 2005, 690, 8, 2017, 2026, ISI:000228788500016
 46. Goldoni, L, Cravotto, G, Penoni, A, Tollari, S, Palmisano, G, The rhodium carbenoid route to 3-aryl-4-hydroxycoumarins: Synthesis of derrusnin, SYNLETT, APR 6, 2005, 6, 927, 930, ISI:000228272400009
 47. Giovenzana, GB, Palmisano, G, Del Grosso, E, Giovannelli, L, Penoni, A, Pilati, T, Polycyclic compounds from aminopolyols and alpha-dicarbonyls: structure and application in the synthesis of exoditopic ligands, ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY, 2005, 3, 8, 1489, 1494, ISI:000228303800022
 48. Aime, S, Botta, M, Cravotto, G, Frullano, L, Giovenzana, GB, Crich, SG, Palmisano, G, Sisti, M, Gadolinium(III) complexes of dota-derived N-sulfonylacetamides, (H-4(dota-NHSO2R)=10-{2-[(R)sulfonylamino]-2-oxoethyl}-1,4,7,10-tetraaza, cyclododecane-1,4,7-triacetic acid): A new class of relaxation agents for magnetic resonance imaging applications, HELVETICA CHIMICA ACTA, 2005, 88, 3, 588, 603, ISI:000228246500019
 49. Ribas, X, Sironi, A, Masciocchi, N, Lopes, EB, Almeida, M, Veciana, J, Rovira, C, Structural, magnetic, and electrical characterization of new polycrystalline phases of nickel- and platinum-doped [(DT-

- TTF)_n][Au(mnt)(2)] (n=1,2), INORGANIC CHEMISTRY, APR 4, 2005, 44, 7, 2358, 2366, ISI:000228054200031
50. Broggin, G, Chiesa, K, De Marchi, I, Martinelli, M, Pilati, T, Zecchi, G, Efficient approach to the unknown isoxazolo[3,4-d]thieno[2,3-b]pyridine system by regioselective intramolecular nitrene cycloadditions, TETRAHEDRON, APR 4, 2005, 61, 14, 3525, 3531, ISI:000227930800008
 51. Maldotti, A, Amadelli, R, Samiolo, L, Molinari, A, Penoni, A, Tollari, S, Cenini, S, Photocatalytic formation of a carbamate through ethanol-assisted carbonylation of p-nitrotoluene, CHEMICAL COMMUNICATIONS, 2005, 13, 1749, 1751, ISI:000227893300026
 52. Cravotto, G, Beggiano, M, Penoni, A, Palmisano, G, Tollari, S, Leveque, JM, Bonrath, W, High-intensity ultrasound and microwave, alone or combined. Promoted Pd/C-catalyzed aryl-aryl couplings, TETRAHEDRON LETTERS, MAR 28, 2005, 46, 13, 2267, 2271, ISI:000227754000022
 53. Piarulli, U, Daubos, P, Claverie, C, Monti, C, Gennari, C, Copper-catalysed, enantioselective desymmetrisation of meso cyclic allylic bis(diethyl phosphates) with organozinc reagents, EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, FEB 25, 2005, 5, 895, 906, ISI:000227426900015
 54. Stazi, F, Palmisano, G, Turconi, M, Santagostino, M, Statistical experimental design-driven discovery of room-temperature conditions for palladium-catalyzed cyanation of aryl bromides, TETRAHEDRON LETTERS, MAR 14, 2005, 46, 11, 1815, 1818, ISI:000227411400010
 55. Barea, E, Romero, MA, Navarro, JAR, Salas, JM, Masciocchi, N, Galli, S, Sironi, A, Structure, spectroscopic properties, and reversible solid-to-solid reactions of metal complexes of 5-nitro-pyrimidin-2-olate, INORGANIC CHEMISTRY, MAR 7, 2005, 44, 5, 1472, 1481, ISI:000227346300048
 56. Vicente, J, Arcas, A, Fernandez-Hernandez, JM, Sironi, A, Masciocchi, N, An unprecedented process involving normal and redox transmetallation reactions between Hg and Pt affording the unexpected K[Pt-2{CH₂C(O)Me}(6)(μ-Cl)(3)] complex: the key role of X-ray powder diffraction in unravelling its nature and structure, CHEMICAL COMMUNICATIONS, 2005, 10, 1267, 1269, ISI:000227320300006
 57. Deliy, IV, Maksimchuk, NV, Psaro, R, Ravasio, N, Dal Santo, V, Recchia, S, Paukshtis, EA, Golovin, AV, Semikolenov, VA, Kinetic peculiarities of cis/trans methyl oleate formation during hydrogenation of methyl linoleate over Pd/MaO, APPLIED CATALYSIS A-GENERAL, JAN 28, 2005, 279, 1-2, 99, 107, ISI:000226759300010
 58. Masciocchi, N, Scuderi, P, Maspero, A, Brooker's di-tert-butylmerocyanine, ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION E-

- STRUCTURE REPORTS ONLINE, FEB, 2005, 61, Part 2, O227, O229, ISI:000226692400096
59. Beccalli, EM, Broggin, G, Martinelli, M, Paladino, G, Pd-catalyzed intramolecular cyclization of pyrrolo-2-carboxamides: regio-divergent routes to pyrrolo-pyrazines and pyrrolo-pyridines, TETRAHEDRON, JAN 31, 2005, 61, 5, 1077, 1082, ISI:000226565400004
 60. Broggin, G, De Marchia, I, Martinelli, M, Paladino, G, Penoni, A, Intramolecular azide cycloaddition enroute to the new pyrrolo[2,1-c][1,2,3]triazolo[1,5-a][1,4]benzodiazepine skeleton, LETTERS IN ORGANIC CHEMISTRY, JUL, 2004, 1, 3, 221, 223, ISI:000226130100006
 61. Di Iorio, A, Lasserre, B, Scippa, GS, Chiatante, D, Root system architecture of Quercus pubescens trees growing on different sloping conditions, ANNALS OF BOTANY, JAN, 2005, 95, 2, 351, 361, ISI:000226371000012
 62. Fois, E, Gamba, A, Tabacchi, G, Arletti, R, Quartieri, S, Vezzalini, G, The "template" effect of the extra-framework content on zeolite compression: The case of yugawaralite, AMERICAN MINERALOGIST, JAN, 2005, 90, 1, 28, 35, ISI:000226318500004
 63. Malpezzi, L, Brenna, E, Fuganti, C, Masciocchi, N, Pellegatta, C, Ventimiglia, G, Polymorphism in acitretin, PHARMAZEUTISCHE INDUSTRIE, 2004, 66, 12, 1551, 1556, ISI:000226063800006
 64. Beccalli, EM, Broggin, G, Paladino, G, Zoni, C, Palladium-mediated approach to dibenzo[b,e][1,4]diazepines and benzopyrido-analogues. An efficient synthesis of tarpane, TETRAHEDRON, JAN 3, 2005, 61, 1, 61, 68, ISI:000225650200004
 65. Ardizzola, GA, Brenna, S, Castelli, F, Galli, S, LaMonica, G, Masciocchi, N, Maspero, A, Metal imidazolato polymers: synthesis, characterization and crystal structure of new silver(I) triphenylphosphine derivatives, POLYHEDRON, DEC 2, 2004, 23, 18, 3063, 3068, ISI:000225603400006
 66. Aime, S, Calabi, L, Cavallotti, C, Gianolio, E, Giovenzana, GB, Losi, P, Maiocchi, A, Palmisano, G, Sisti, M, [Gd-AAZTA](-): A new structural entry for an improved generation of MRI contrast agents, INORGANIC CHEMISTRY, NOV 29, 2004, 43, 24, 7588, 7590, ISI:000225364600011
 67. Polo, E, Losio, S, Zecchi, G, Bertini, F, Sacchi, MC, Effect of titanium on fluxional Behavior of unbridged metallocene catalysts, MACROMOLECULAR RAPID COMMUNICATIONS, NOV 3, 2004, 25, 21, 1845, 1850, ISI:000225136400006
 68. Cravotto, G, Balliano, G, Tagliapietra, S, Palmisano, G, Penoni, A, Umbelliferone aminoalkyl derivatives, a new class of squalene-hopene cyclase inhibitors, EUROPEAN JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY, NOV, 2004, 39, 11, 917, 924, ISI:000225171200002

69. Beccalli, E, Brogini, G, Contini, A, De Marchi, I, Zecchi, G, Zoni, C, Intramolecular cycloadditions of nitrones derived from optically active 1-alkenyl-2-imidazolecarbaldehydes: regio- and diastereoselectivity, *TETRAHEDRON-ASYMMETRY*, OCT 18, 2004, 15, 20, 3181, 3187, ISI:000224715200003
70. Fantin, G, Fogagnolo, M, Bortolini, O, Masciocchi, N, Galli, S, Sironi, A, Structural and analytical powder diffraction studies of the enantioselective inclusion of chiral arylmethylsulfoxides in dehydrocholic acid cocrystals, *NEW JOURNAL OF CHEMISTRY*, 2004, 28, 11, 1295, 1300, ISI:000224894700005
71. Boaro, M, Giordano, F, Recchia, S, Dal Santo, V, Giona, M, Trovarelli, A, On the mechanism of fast oxygen storage and release in ceria-zirconia model catalysts, *APPLIED CATALYSIS B-ENVIRONMENTAL*, SEP 28, 2004, 52, 3, 225, 237, ISI:000224719800008
72. Cravotto, G, Palmisano, G, Tollari, S, Nano, GM, Penoni, A, The Suzuki homocoupling reaction under high-intensity ultrasound, *ULTRASONICS SONOCHEMISTRY*, JAN, 2005, 12, 1-2, 91, 94, ISI:000224680600015
73. Ceriani, C, Laio, A, Fois, E, Gamba, A, Martonak, R, Parrinello, M, Molecular dynamics simulation of reconstructive phase transitions on an anhydrous zeolite, *PHYSICAL REVIEW B*, SEP, 2004, 70, 11, 113403, ISI:000224209500019
74. Monticelli, D, van den Berg, CMG, Pozzi, A, Dossi, C, Copper speciation in glacial stream waters of Rutor Glacier (Aosta Valley, Italy), *AUSTRALIAN JOURNAL OF CHEMISTRY*, 2004, 57, 10, 945, 949, ISI:000224302400007
75. Monti, C, Gennari, C, Piarulli, U, Rh-catalysed asymmetric hydrogenations with a dynamic library of chiral tropos phosphorus-ligands, *TETRAHEDRON LETTERS*, SEP 6, 2004, 45, 37, 6859, 6862, ISI:000223666300008
76. Vicente, J, Gil-Rubio, J, Bautista, D, Sironi, A, Masciocchi, N, Synthesis and reactivity of fluoro complexes: Part 2. Rhodium(I) fluoro complexes with alkene and phosphine ligands. Synthesis of the first, isolated rhodium(I) bifluoride complexes. Structure of [Rh-3(mu(3)-OH)(2)(COD)(3)](HF2) by X-ray powder diffraction, *INORGANIC CHEMISTRY*, SEP 6, 2004, 43, 18, 5665, 5675, ISI:000223680200026
77. Monti, C, Gennari, C, Steele, RM, Piarulli, U, A modular approach to a new class of monodentate chiral phosphorus ligands and their application in enantioselective copper-catalysed conjugate additions of diethylzinc to cyclohexenone, *EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*, AUG 13, 2004, 16, 3557, 3565, ISI:000223457500020
78. Mortoni, A, Martinelli, M, Piarulli, U, Regalia, N, Gagliardi, S, Microwave-assisted solvent-free synthesis of a quinoline-3,4-

- dicarboximide library on inorganic solid supports, TETRAHEDRON LETTERS, AUG 23, 2004, 45, 35, 6623, 6627, ISI:000223384700021
79. Benincori, T, Rizzo, S, Pilati, T, Ponti, A, Sada, M, Pagliarini, E, Ratti, S, Giuseppe, C, de Ferra, L, Sannicolo, F, Process-scale preparation of enantiomerically pure gamma-lactones by asymmetric hydrogenation of gamma-ketoesters and comparative tests of, the sensory properties of some antipodes, TETRAHEDRON-ASYMMETRY, JUL 26, 2004, 15, 14, 2289, 2297, ISI:000223219400031
80. Beccalli, EM, Broggin, G, Paladino, G, Penoni, A, Zoni, C, Regioselective formation of six- and seven-membered ring by intramolecular Pd-catalyzed amination of N-allyl-anthranilamides, JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, AUG 20, 2004, 69, 17, 5627, 5630, ISI:000223278200014
81. Bressanini, D, Morosi, G, Tarasco, S, Mira, A, Delayed rejection variational Monte Carlo, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, AUG 22, 2004, 121, 8, 3446, 3451, ISI:000223234200012
82. Aime, S, Cavallotti, C, Cravotto, G, Giovenzana, GB, Palmisano, G, Synthesis of new polyoxapolyearboxylic ligands for lanthanide(III) ions, complexation, TETRAHEDRON LETTERS, JUL 19, 2004, 45, 30, 5901, 5903, ISI:000222810700028
83. Tibaldi, A, Vezzoli, L, A new type of volcano flank failure: The resurgent caldera sector collapse, Ischia, Italy, GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS, JUL 21, 2004, 31, 14, L14605, ISI:000222915400005
84. Nova, I, Castoldi, L, Prinetto, F, Dal Santo, V, Lietti, L, Tronconi, E, Forzatti, P, Ghiotti, G, Psaro, R, Recchia, S, NOx adsorption study over Pt-Ba/alumina catalysts: FT-IR and reactivity study, TOPICS IN CATALYSIS, JUL, 2004, 30-31, 1-4, 181, 186, ISI:000222595000029
85. Fois, E, Gamba, A, Spano, E, Competition between water and hydrogen peroxide at Ti center in Titanium zeolites. An ab initio study, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, JUL 15, 2004, 108, 28, 9557, 9560, ISI:000222639900001
86. Muccini, M, Loi, MA, Kenevey, K, Zamboni, R, Masciocchi, N, Sironi, A, Blue luminescence of facial tris(quinolin-8-olato)aluminum(III) in solution, crystals and thin films, ADVANCED MATERIALS, JUN 4, 2004, 16, 11, 861, 864, ISI:000222518300001
87. Bressanini, D, Morosi, G, Stability of (He2HeM)-He-3-He-4 and (He3HeM)-He-3-He-4 L=0, 1 clusters, FEW-BODY SYSTEMS, MAY, 2004, 34, 1-3, 131, 135, ISI:000222009500022
88. Rampazzi, L, Andreotti, A, Bonaduce, I, Colombini, MP, Colombo, C, Toniolo, L, Analytical investigation of calcium oxalate films on marble monuments, TALANTA, JUL 8, 2004, 63, 4, 967, 977, ISI:000222063600021
89. Gallo, E, Ragaini, F, Bilello, L, Cenini, S, Gennari, C, Piarulli, U, Copper catalysed 1,4-addition of organozinc reagents to alpha,beta-

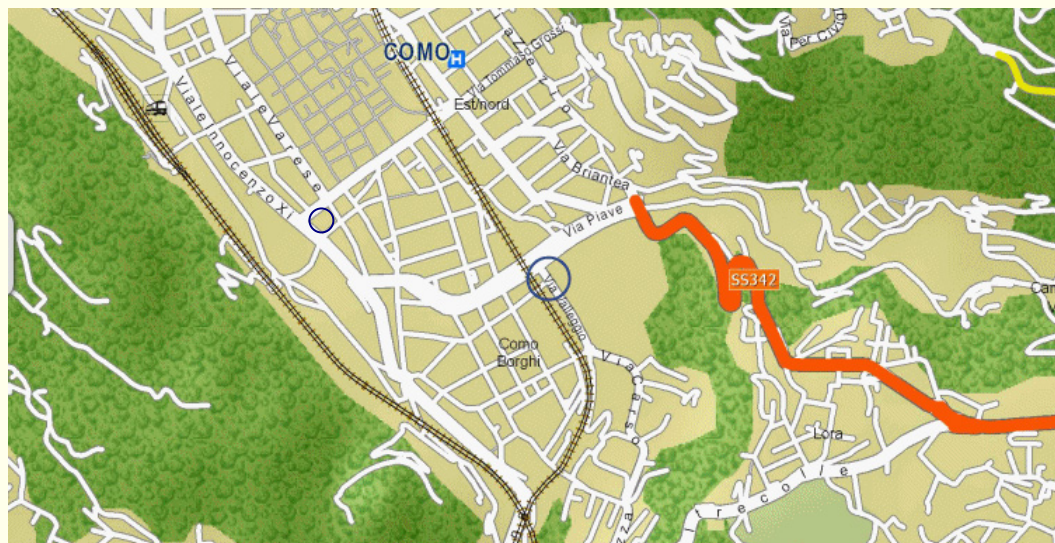
- unsaturated carbonyl compounds: a mechanistic investigation, *JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY*, JUL 1, 2004, 689, 13, 2169, 2176, ISI:000222079900003
90. Rizzo, S, Sannicolo, F, Benincori, T, Schiavon, G, Zecchin, S, Zotti, G, Calix[4]arene-functionalized poly-cyclopenta[2,1-b;3,4-b']bithiophenes, with good recognition ability and selectivity for small organic molecules for application in QCM-based sensors, *JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY*, 2004, 14, 12, 1804, 1811, ISI:000221908200006
 91. Dossi, C, Pozzi, A, Recchia, S, Giussani, B, Dal Santo, V, Rejuvenating old computerized spectrometric instrumentation: Discussion of two case histories, *ANNALI DI CHIMICA*, MAR, 2004, 94, 3, 155, 163, ISI:000221717100006
 92. Bertini, L, Mella, M, Bressanini, D, Morosi, G, Borromean binding in H-2 with Yukawa potential: A nonadiabatic quantum Monte Carlo study, *PHYSICAL REVIEW A*, APR, 2004, 69, 4, 042504, ISI:000221276400053
 93. Cassino, C, Gabano, E, Ravera, M, Cravotto, G, Palmisano, G, Vessieres, A, Jaouen, G, Mundwiler, S, Alberto, R, Osella, D, Platinum(II) and technetium(I) complexes anchored to ethynylestradiol: a way to drug targeting and delivery, *INORGANICA CHIMICA ACTA*, MAY 10, 2004, 357, 7, 2157, 2166, ISI:000221011100022
 94. Aime, S, Cavallotti, C, Gianolio, E, Giovenzana, GB, Palmisano, G, Sisti, M, Mannich reaction as a new route to pyridine-based polyaminocarboxylic ligands, *ORGANIC LETTERS*, APR 15, 2004, 6, 8, 1201, 1204, ISI:000220709100004
 95. Roberts, GP, Michetti, AM, Spatial and temporal variations in growth rates along active normal fault systems: an example from the Lazio-Abruzzo Apennines, central, Italy, *JOURNAL OF STRUCTURAL GEOLOGY*, 2004, 26, 2, 339, 376, ISI:000220644500011
 96. Roberts, GP, Cowie, P, Papanikolaou, I, Michetti, AM, Fault scaling relationships, deformation rates and seismic hazards: an example from the Lazio-Abruzzo Apennines, central Italy, *JOURNAL OF STRUCTURAL GEOLOGY*, 2004, 26, 2, 377, 398, ISI:000220644500012
 97. Barea, E, Navarro, JAR, Salas, JM, Masciocchi, N, Galli, S, Sironi, A, Mineralomimetic sodalite- and muscovite-type coordination frameworks. Dynamic crystal-to-crystal interconversion processes sensitive to ion pair recognition, *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, MAR 17, 2004, 126, 10, 3014, 3015, ISI:000220192000005
 98. Chiesa, S, Mella, M, Morosi, G, Quantum Monte Carlo estimators for the positron-electron annihilation rate in bound and low-energy scattering states, *PHYSICAL REVIEW A*, FEB, 2004, 69, 2, 022701, ISI:000189386300060
 99. Beccalli, E, Broggin, G, Paladino, G, Pilati, T, Pontremoli, G, Diastereoselective synthesis of enantiopure (alpha, R)-2-methyl-4-(alpha-

- phenylethyl)-1,2,3,4-tetrahydro-benzo[e][1,4]diazepin-5-ones, TETRAHEDRON - ASYMMETRY, FEB 23, 2004, 15, 4, 687, 692, ISI:000189116300016
100. Galli, S, Masciocchi, N, Sironi, A, Ab initio X-ray powder diffraction characterisation of molecule-based magnetic materials, JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS, APR, 2004, 65, 4, Sp. Iss. SI, 693, 696, ISI:000189219700004
 101. Stazi, F, Palmisano, G, Turconi, M, Clini, S, Santagostino, M, Accelerated Koenigs-Knorr glucuronidation of a deactivated nitrophenol: Unveiling the role of polyamine additive 1,1,4,7,10,10-hexamethyltriethylenetetramine through design of experiments, JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, FEB 20, 2004, 69, 4, 1097, 1103, ISI:000188955400011
 102. Ferro, O, Quartieri, S, Vezzalini, G, Ceriani, C, Fois, E, Gamba, A, Cruciani, G, Dehydration dynamics of bikitaite: Part I. In situ synchrotron powder X-ray diffraction study, AMERICAN MINERALOGIST, JAN, 2004, 89, 1, 94, 101, ISI:000188115000012
 103. Ceriani, C, Fois, E, Gamba, A, Tabacchi, G, Ferro, O, Quartieri, S, Vezzalini, G, Dehydration dynamics of bikitaite: Part II. Ab initio molecular dynamics study, AMERICAN MINERALOGIST, JAN, 2004, 89, 1, 102, 109, ISI:000188115000013
 104. Fois, E, Gamba, A, Spano, E, Ab initio molecular dynamics simulation of the interaction between water and Ti in zeolitic systems, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, JAN 8, 2004, 108, 1, 154, 159, ISI:000187838800024
 105. Scippa, GS, Di Michele, M, Onelli, E, Patrignani, G, Chiatante, D, Bray, EA, The histone-like protein H1-S and the response of tomato leaves to water deficit, JOURNAL OF EXPERIMENTAL BOTANY, JAN, 2004, 55, 394, 99, 109, ISI:000187465300012



I Laboratori Didattici e di Ricerca del Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali, situati in via Castelnuovo 7 e via Lucini 3 in Como.

Mappa della Città di Como



Dipartimento di Scienze Chimiche e Ambientali, Università degli Studi dell'Insubria

- sedi di via Valleggio e di via Castelnuovo 7
- sede di via Lucini 3