

# Attualità

## XLIX CONGRESSO DELLA DIVISIONE DI CHIMICA FISICA

**Piero Ugliengo**

*Dipartimento di Chimica*

*Università di Torino*

[piero.ugliengo@unito.it](mailto:piero.ugliengo@unito.it)

*Lo scorso settembre si è svolta a Torino la XLIX edizione del Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana, organizzato dal Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino. Il congresso ha riunito le diversità scientifiche dell'ampia comunità dei chimico-fisici italiani, con il contributo di colleghi stranieri. Il tema portante del congresso è stato: "Chimica Fisica: un nuovo sguardo sul mondo microscopico"*

### **XLIX Congress of the Physical Chemistry Division of the SCI**

The XLIX edition of the National Congress of the Physical Chemistry Division of the Italian Chemical Society, organized by the Chemistry Department of the University of Turin, took place in Turin from 4 to 7 September 2023. The congress brought together the scientific diversity of the broad Italian physical chemistry community, with contributions from foreign colleagues. The main theme of the congress was 'Physical Chemistry: a fresh glimpse into the microscopic world'

La nuova edizione del [XLIX Congresso della Divisione di Chimica Fisica della SCI](#), organizzato dal Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino dal 4 al 7 settembre 2023 si è svolta a Torino, presso la sede del Dipartimento di Biotecnologie Molecolari e Scienze della Vita. Questo evento fu organizzato dall'Università di Torino, nel lontano 1985, nella I edizione della neonata Divisione di Chimica Fisica. È stata, perciò, una bella occasione per ritrovare a Torino, colleghi e amici di vecchia data e giovani promesse. Il filo scientifico su cui si dipana il congresso, deciso in accordo con il consiglio direttivo, è tipicamente frutto delle esperienze e delle storie scientifiche dei membri del comitato organizzatore locale. La sede Torinese ha voluto enfatizzare, nella XLIX edizione, il forte carattere fondamentale della Chimica Fisica, proponendo come motivo portante del congresso: "Chimica Fisica: un nuovo sguardo sul mondo microscopico". L'obiettivo della conferenza è stato mostrare come l'approccio chimico-fisico, basato su una visione multi-scala della materia, offra contributi fondamentali, attraverso metodologie sperimentali, teoriche e di modellazione al computer, in campi che vanno dall'astrochimica, alla biochimica, alla catalisi, alla soft-matter e alla scienza dei materiali (solo per citarne alcuni).

Il convegno ha ospitato oltre 230 partecipanti provenienti dalle più importanti istituzioni universitarie e centri di ricerca (CNR, ITT) italiani ed esteri. La presenza di 20 ricercatori stranieri, tra cui 3 relatori di conferenze plenarie, ha dato respiro a collaborazioni e contatti internazionali. Tra i partecipanti, ben il 38% erano PhD, il 20% PostDoc, il 16% RTDA(B), il 4% studenti di master e solo il 22% era costituito da posizioni permanenti. Nel totale, la quota di partecipanti di età inferiore ai 35 anni è stata del 54%, con un bilancio di genere M/F di 1,6, un risultato che mostra quanto sia vitale, giovane e promettente per il futuro la comunità Chimico Fisica.



Fig. 1 - Gli enti organizzatori e di patrocinio del convegno (a sinistra) e l'insieme degli sponsor privati (a destra)

Il convegno si è aperto con i saluti introduttivi della Prof.ssa Fiorella Altruda del Dipartimento di Biotecnologie Molecolari e Scienze della Vita, seguiti da quelli della Prof.ssa Laura Anfossi, vicedirettrice del Dipartimento di Chimica. La cerimonia di apertura è proseguita con una breve relazione del Prof. Piero Ugliengo relativa ai dettagli operativi e agli scopi del congresso, culminata dalla consegna della medaglia Bonino della Divisione di Chimica Fisica alla Prof.ssa Angela Agostiano dell'Università di Bari, da parte del presidente della Divisione di Chimica Fisica,



Prof. Moreno Meneghetti. La motivazione del premio fa riferimento agli importanti contributi chimico-fisici nello studio di processi fotochimici e fotofisici della conversione dell'energia, nella progettazione e la preparazione di materiali e nanomateriali per il riconoscimento molecolare e la biosensoristica e per lo sviluppo delle metodologie chimico-fisiche per lo studio dei processi indagati, con conseguente creazione di un attivo gruppo di ricerca all'Università e al CNR di Bari.

Fig. 2 - Momenti della consegna della medaglia Bonino alla Prof.ssa Angela Agostiano

Il programma congressuale prevedeva sei sessioni tematiche, aperte da altrettante *plenary lectures*. Le tematiche individuate per organizzare le diverse sessioni congressuali che si sono svolte in parallelo su 3 aule sono riportate in Fig. 3. Ben 15 *keynotes* di 30 minuti, selezionate tra i contributi ritenuti più interessanti dai comitati organizzatore e scientifico del congresso, completavano il quadro scientifico del congresso. Tutte le presentazioni sono state tenute in inglese, favorendo la discussione a fine intervento da parte dei molti ospiti stranieri che hanno dato un contributo fondamentale alla crescita scientifica dei giovani *speakers*. In sintesi (si veda la Fig. 3) la partecipazione delle varie sedi italiane è stata molto ampia sull'intero stivale, con oltre 120 contributi orali di 15 minuti, 38 presentazioni flash di 5 minuti e 63 poster. La distribuzione dei contributi tra le varie tematiche vede il *Topic 1 (Physical chemistry of Materials)* dominante, seguito dal *Topic 2 (Physical chemistry of soft matter and life science)* e dal *Topic 4*

(*Theoretical and computational chemistry*). Gli atti del convegno, inclusivo di tutti gli abstract dei contributi, sono disponibili a [questo sito web](#) gestito dall'Ateneo dell'Università di Torino.

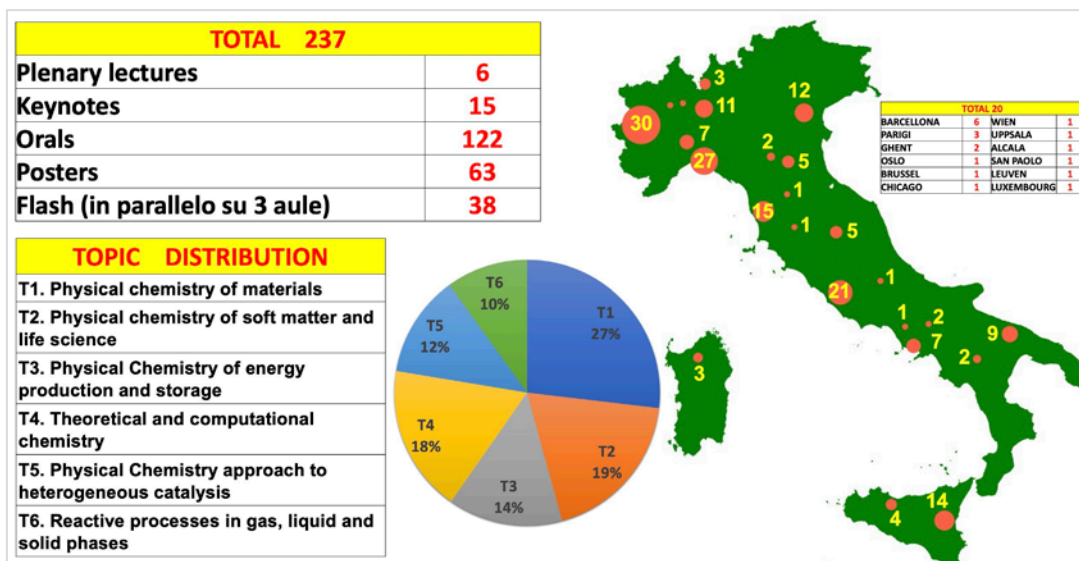


Fig. 3 - Dati relativi alla partecipazione, agli interventi, alla distribuzione dei contributi per sede e alla distribuzione dei Topics scientifici

I contributi degli *invited speakers* sono riassunti nel seguito. Ulrike Diebold (Università di Vienna) con il contributo T1: “*Seeing is believing: A direct view of surface chemistry*”, ha mostrato come le reazioni chimiche sulle superfici siano centrali per un’ampia gamma di applicazioni e siano il cuore della catalisi eterogenea e come, grazie ai metodi della scienza delle superfici, sia possibile una comprensione più approfondita del sito attivo e dei meccanismi di reazione. Sono stati illustrati alcuni esempi, tra cui la misurazione di proprietà su scala atomica e di catalizzatori “a singolo atomo” studiati con sistemi modello appropriati.

Benedetta Mennucci (Università di Pisa), ha mostrato con T2: “*Light-driven processes in biology through the lenses of physical chemistry*”, che per studiare molti processi fondamentali in biologia relativi a proteine reattive alla luce, sia necessaria una caratterizzazione temporale e spaziale di alta precisione, che risulta estremamente impegnativa a causa delle numerose scale temporali e di lunghezza coinvolte. A tal fine, una possibile strategia consiste nell’integrare i risultati di sofisticati metodi spettroscopici con un’accurata modellazione molecolare che è stata illustrata con l’applicazione a diverse proteine fotosensibili.

Danilo Dini (Università La Sapienza di Roma) ha illustrato il tema T3: “*Hybrid systems for the conversion of light into electrical energy*”, in cui la realizzazione di sistemi fotoattivi può avvenire per (i) la combinazione di nanostrutture di semiconduttori inorganici con coloranti-sensibilizzanti molecolari e (ii) le perovskiti a base di alogeni contenenti cationi monovalenti poliatomici. Tali soluzioni rappresentano i sistemi ibridi alla base delle tecnologie fotovoltaiche quali la cella solare a coloranti-sensibilizzanti (DSC) e la cella solare a perovskiti (PSC). È stato enfatizzato come la comprensione dei meccanismi di generazione/trasferimento di carica che operano nei sistemi fotoattivi delle DSC e delle PSC sia fondamentale per l’identificazione delle cause primarie che controllano le prestazioni di foto conversione nei rispettivi dispositivi e per il successivo sviluppo di nuovi materiali, delle loro combinazioni e di nuove configurazioni per un ulteriore miglioramento delle prestazioni dei dispositivi.

Alexandre Tkatchenko (Università del Lussemburgo) ha mostrato in T4: “*Fully Quantum (Bio)Molecular Simulations: Dream or Reality?*”, come la convergenza tra modelli (e codici) quantomeccanici accurati (QM) e metodi efficienti di apprendimento automatico (ML) sembra promettere un cambiamento di paradigma nelle simulazioni molecolari. Molte applicazioni

impegnative vengono ora affrontate da metodologie QM/ML come la modellazione di materiali covalenti, molecole, cristalli molecolari, superfici e persino intere proteine in acqua esplicita. In questo intervento si è fatto il punto su questi recenti progressi e sugli sviluppi necessari per consentire una dinamica completamente quantistica di complessi sistemi funzionali (bio)molecolari.

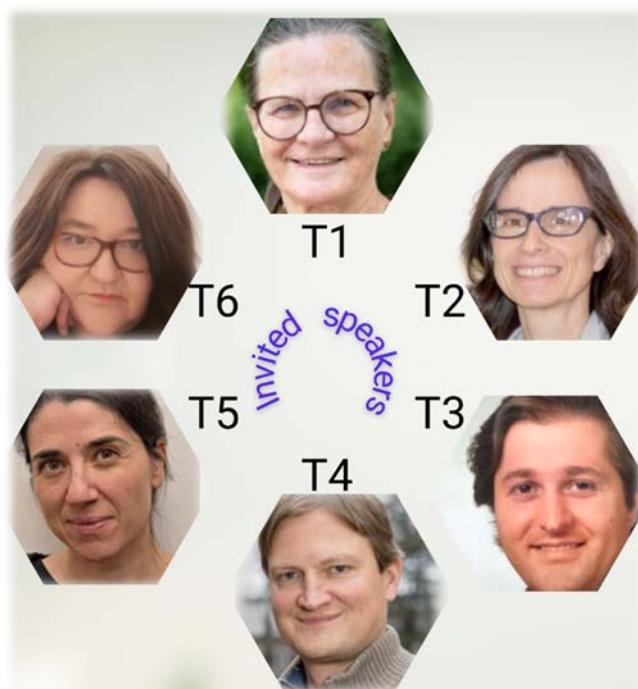
Ainara Nova (Università di Oslo), ha mostrato T5: *“Modelling reaction mechanisms of multicomponent catalytic systems”*, che per ottenere trasformazioni più impegnative, come l’attivazione selettiva dei legami inerti, i catalizzatori sono diventati sempre più complessi. Per combinare attività e selettività, molti di questi sistemi contengono diversi componenti attivi, che devono essere ben definiti e cooperare. Questa proprietà, ben nota in natura, è relativamente nuova nella catalisi omogenea ed eterogenea e il loro studio comporta sfide metodologiche. Come esempi vengono illustrati i catalizzatori multicomponente utilizzati nella riduzione della CO<sub>2</sub>.

Infine, Nadia Balucani (Università di Perugia), ha introdotto il tema T6: *“Unveiling the secrets of bimolecular reactions at the microscopic level”*, dove ha mostrato come un approccio chimico-fisico è fondamentale per capire come avvengono le reazioni chimiche a livello microscopico. Tra le tecniche sperimentali che possono essere utilizzate per chiarire i meccanismi di reazione, la tecnica del fascio molecolare incrociato con rivelazione spettrometrica di massa, sviluppata dai premi Nobel Y.T. Lee e D.R. Herschbach, risulta la più versatile per affrontare lo studio di una varietà di sistemi reattivi. Si è visto come solo di recente, i miglioramenti nella produzione di fasci di specie transitorie e nella tecnologia del vuoto hanno permesso di studiare reazioni elementari che coinvolgono l’ossigeno atomico nel suo stato elettronico fondamentale, O(<sup>3</sup>P), o l’azoto atomico nel suo primo stato elettronicamente eccitato, N(<sup>2</sup>D), con idrocarburi insaturi e aromatici. I sistemi studiati sono rilevanti per la chimica della combustione, per la chimica del mezzo interstellare o per la chimica dell’atmosfera superiore di Titano, la luna gigante di Saturno, con potenziali implicazioni nella chimica prebiotica.

Tra le *keynotes*, tutte di elevato livello scientifico e molto stimolanti, è stata di particolare rilevanza scientifica e umana quella tenuta da Jean-Francois Lambert (Università Sorbona di Parigi) *“Steps towards Life - How inorganic surfaces may have been involved in the complexification of biomolecules”* nel ricordo dei temi di ricerca cari al nostro collega Gianmario Martra, scomparso prematuramente nel 2020. Nel contesto prebiotico, viene proposto come sia stato probabile che le superfici inorganiche abbiano accompagnato o in qualche modo indirizzato l’aumento della complessità delle biomolecole che ha, infine, prodotto la Vita. Si è illustrato il caso della polimerizzazione-condensazione degli amminoacidi in peptidi (o dei nucleotidi in acidi nucleici), che pur proibita in soluzione, si verifica su superfici come la silice o la titania sottoposte a condizioni fluttuanti (cicli di bagnatura e asciugatura), con il record di lunghezza per i polipeptidi (fino a 20 meri) ottenuto negli studi di G. Martra e collaboratori. Di particolare rilevanza è stato il contributo recentemente pubblicato sulla rivista Nature *“The electron-proton bottleneck of photosynthetic oxygen evolution”* da parte di Daniele Narzi e collaboratori (Università dell’Aquila), in cui la combinazione di metodi teorici e tecniche sperimentali sofisticate hanno permesso un avanzamento significativo nella comprensione della formazione fotosintetica dell’O<sub>2</sub>, in cui si è messo in evidenza il ruolo del sito proteico contenente il cluster Mn<sub>4</sub>Ca.

Tutte le conferenze hanno suscitato grande interesse e sollevato numerose domande e curiosità da parte del pubblico, in particolare dai più giovani.

Il congresso non si è limitato ai soli lavori di specifico interesse, ma è stato organizzato, nella serata di martedì 5 settembre, presso l’aula magna della Cavallerizza Reale, un evento aperto al pubblico sul tema *“Clima ed energia: quali scelte per il futuro”*, che ha visto coinvolti Nicola Armaroli (CNR di Bologna) e Daniele Tomatis (R&D *newcleo*) e il giornalista scientifico Alberto Agliotti quale moderatore e una larga partecipazione. L’incontro, ha voluto fare il punto su base



scientifiche di tutte quelle soluzioni atte alla produzione di energie rinnovabili e a emissione zero di CO<sub>2</sub>, con particolare enfasi sul fotovoltaico e sulla realizzazione dei reattori a fissione nucleare di tipo Small Modular Generation IV (SMG) con riciclo del combustibile nucleare.

Fig. 4 - Gli invited speakers: T1: Ulrike Diebold (Physical Chemistry of Materials); T2: Benedetta Mennucci (Physical Chemistry of soft matter and life science); T3: Danilo Dini (Physical Chemistry of energy production and storage); T4: Alexandre Tkatchenko (Theoretical and computational chemistry); T5: Ainara Nova (Physical Chemistry approach to heterogeneous catalysis); T6: Nadia Balucani (Reactive processes in gas, liquid, and solid phases)

I lavori si sono conclusi con la relazione finale del congresso e la consegna dei premi della Divisione di Chimica Fisica, a cui è dedicata [questa pagina del sito web del congresso](#). Hanno ricevuto il *Giovanni Semerano Award* per la miglior tesi dottorale, Francesco Tavani (Università di Roma La Sapienza), il *Distinguished Physical Chemistry Award* a Valentina Spampinato (Università di Catania) e Gloria Tabacchi (Università dell'Insubria), il *Young Physical Chemistry Award* a Elena Piacenza (Università di Palermo) e Giacomo Melani (Università di Chicago) e il *Lucio Senatore Award* per il miglior poster a Sophia Victoria Ochoa Meza (Università di Genova) e a Vittorio Bariosco (Università di Torino).

Il prossimo appuntamento con il congresso della Divisione di Chimica Fisica si terrà a Pisa nel luglio del 2025. Arrivederci a Pisa!