



Argomenti di TESI MAGISTRALE proposti dal Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica

ASPETTI TEORICI

- Studio teorico dell'osmoprotezione: simulazioni di molecole che si comportano come chaperoni
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- Utilizzo e sviluppo di tecniche di docking per il drug design
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- Determinazione ab-initio di potenziali intermolecolari: il legame ad idrogeno ed il legame ad alogeno
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- Sviluppo di metodi quantistici basati sull'uso di orbitali molecolari estremamente localizzati
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- Studio con tecniche ibride (quantum mechanics/molecular mechanics) del sito attivo di un enzima
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- La tubulina come target di farmaci antitumorali: design e sviluppo in silico di nuove molecole
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- Modellizzazione delle interazioni proteina-proteina
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- Dinamica quantistica di *scattering* e di diffusione di atomi leggeri su superficie
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto
- Funzionalizzazione di superfici e *hydrogen storage*: studi *first-principles* nell'approccio slab-supercella
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto
- Funzionalizzazione di superfici e *hydrogen storage*: simulazioni di processi dinamici
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto
- Calcolo quantistico di spettri vibrazionali di molecole adsorbite su superfici
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto
- Formazione di idrogeno nel mezzo interstellare: dinamica di reazione Eley-Rideal su grafite
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto
- Formazione di idrogeno nel mezzo interstellare: dinamica quantistica di *sticking* di atomi su superficie nell'approssimazione locale a stati coerenti
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto
- Reazioni di formazione di CH^+ nel mezzo interstellare: dinamica quantistica non-adiabatica
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto
- Sviluppo di metodi teorici per la dinamica semiclassica e quantistica
Prof. Gianfranco Tantardini, Dott. Rocco Martinazzo e Dott. Michele Ceotto

STRUTTURA e REATTIVITA'

- Messa a punto di formulazioni (vernici, coating, inchiostri, ecc.) con caratteristiche mirate all'applicazione finale.
Prof.ssa Silvia Ardizzone e Dott. Giuseppe Cappelletti
- Determinazione della densità elettronica di composti organici di potenziale interesse farmacologico tramite diffrazione di raggi X a bassa temperatura: il caso di un 1,2-tiazete-1,1-diossido derivato.
Prof. Riccardo Destro, Dott. Leonardo Lo Presti
- Energie di interazione intermolecolare in solidi cristallini da dati di diffrazione di raggi X e metodi ab initio.
Prof. Riccardo Destro, Dott. Leonardo Lo Presti
- Effetto del solvente nello studio dei riferimenti redox in solventi misti acquo-organici
Dott. Luigi Falciola
- Meccanismi di trasferimento elettronico in elettrocatalisi organica su elettrodi di Ag, Au e Pd: relazioni struttura / reattività.
Prof.ssa Patrizia Mussini
- Meccanismi di trasferimento elettronico in elettrocatalisi organica su elettrodi di Ag, Au e Pd: effetti del mezzo di reazione (solvente ed elettrolita di supporto).
Prof.ssa Patrizia Mussini
- Materiali coniugati per applicazioni in optoelettronica e in energetica: studio dei meccanismi di trasferimento elettronico, relazioni tra aromaticità e proprietà redox, e preparazione di film polimerici conduttori.
Prof.ssa Patrizia Mussini
- Studio, mediante spettroscopia EPR/FMR, della relazione tra struttura locale, difetti e proprietà para- e ferro-magnetiche di ossidi superconduttori.
Prof. Cesare Oliva
- Studio, mediante spettroscopia EPR/FMR, delle proprietà para- e ferro-magnetiche di ossidi e fluoruri speciali.
Prof. Cesare Oliva
- Catodi compositi a base di argento nano-cristallino per trattamenti di reflui industriali
Prof. Sandra Rondinini e Dott. Alberto Vertova
- Elettrodi chimicamente modificati: aspetti applicativi.
Prof.ssa Sandra Rondinini e Dott. Alberto Vertova
- Sintesi e caratterizzazione di ossidi e fluoruri speciali
Dott. Marco Scavini
- Studio dei difetti e delle proprietà fisiche in sistemi di ossidi e fluoruri speciali
Dott. Marco Scavini
- Studio della relazione tra struttura locale, difetti e proprietà fisiche in sistemi di ossidi superconduttori.
Dott. Marco Scavini

- Studio della struttura a corto e medio raggio in sistemi di ossidi e fluoruri speciali mediante diffrazione di raggi X e di neutroni.
Dott. Marco Scavini
- Cinetica elettrochimica: Produzione e studio di sistemi di riferimento per l'indagine delle reazioni all'interfase (Inner Sphere Reactions, Outer Sphere Reactions).
Prof. Sergio Trasatti

ENERGIA

- Deacidificazione di oli alimentari e reazione di trans esterificazione (produzione di biodiesel)
Prof.ssa Claudia Bianchi e Dott. Carlo Pirola
- Studio della reazione di riduzione di O₂ su carboni modificati
Prof. Leonardo Formaro e Dott.ssa Mariangela Longhi
- Studio della struttura, delle proprietà di trasporto e magnetiche di elettroliti solidi ossidici per celle a combustibile.
Prof. Cesare Oliva e Dott. Marco Scavini
- Materiali nano strutturati multifasici per applicazioni energetiche
Prof.ssa Sandra Rondinini e Dott. Alberto Vertova
- Tecniche potenziodinamiche per caratterizzazione di materiali nanocompositi
Prof.ssa Sandra Rondinini e Dott. Alberto Vertova
- Catalizzatori per la combustione senza fiamma del metano
Dott.ssa Ilenia Rossetti
- Modellazione del rilascio di ossigeno in catalizzatori perovskitici
Dott.ssa Ilenia Rossetti
- Fotocatalisi su semiconduttori per la conversione di energia solare
Prof.ssa Elena Selli
- Produzione di idrogeno per scissione fotocatalitica dell'acqua
Prof.ssa Elena Selli
- Hydrogen Economy: Studio di catalizzatori per la produzione di Idrogeno attraverso l'elettrolisi dell'acqua o di altri composti idrogenati.
Prof. Sergio Trasatti

AMBIENTE

- Sintesi e caratterizzazione di semiconduttori nanocristallini come fotocatalizzatori per processi di bonifica ambientale.
Prof.ssa Silvia Ardizzone e Dott. Giuseppe Cappelletti
- Sviluppo di film sottili, attivi fotocataliticamente, per l'abbattimento di inquinanti presenti nell'aria.
Prof.ssa Silvia Ardizzone e Dott. Giuseppe Cappelletti

- Metodologie alternative per il disinquinamento di acque reflue.
Prof.ssa Silvia Ardizzone e Dott. Giuseppe Cappelletti
- Sviluppo di materiali compositi nanostrutturati con caratteristiche controllate per interventi di salvaguardia in campo agrario.
Prof.ssa Silvia Ardizzone e Dott. Giuseppe Cappelletti
- Degradazione di molecole inquinanti per il disinquinamento di acque reflue e per l'abbattimento di inquinanti in aria mediante tecniche combinate (fotocatalisi, ultrasuoni, ozono).
Prof.ssa Claudia Bianchi e Dott. Carlo Pirola
- Elettrodeposizione di fasi miste ossidiche per depurazione in campo ambientale.
Dott. Giuseppe Cappelletti e Dott. Luigi Falciola
- Trasformazione catalitica di biomasse per lo sfruttamento di fonti energetiche rinnovabili
Prof. Paolo Carniti
- Determinazione elettroanalitica di inquinanti nei generi alimentari.
Dott. Luigi Falciola e Dott.ssa Mariangela Longhi
- Determinazione elettroanalitica di acidi carbossilici in cibi e bevande.
Dott. Luigi Falciola
- Adsorbimento di metalli pesanti su carboni modificati.
Prof. Leonardo Formaro e Dott.ssa Mariangela Longhi
- Catalisi ambientale: reazioni di abbattimento di ossidi di azoto (NO_x) operando in linee di reazione in continuo dotate di reattore catalitico e analizzatore FT-IR in linea.
Prof.ssa Antonella Gervasini
- Determinazione di alogenuri in tracce su elettrodi di argento e altri metalli catalitici.
Prof.ssa Patrizia Mussini
- Tecniche elettroanalitiche applicate alla caratterizzazione e sviluppo di nuove resine polimeriche biocompatibili per l'assorbimento di inquinanti metallici e organici .
Prof.ssa Patrizia Mussini
- Argento nano cristallino per trattamenti di reflui industriali.
Prof.ssa Sandra Rondinini e Dott. Alberto Vertova
- Elettrodi chimicamente modificati: aspetti fondamentali e applicativi.
Prof.ssa Sandra Rondinini e Dott. Alberto Vertova
- Materiali microporosi per lo stoccaggio di idrogeno.
Dott.ssa Ilenia Rossetti
- Fotocatalisi su semiconduttori per la degradazione di inquinanti delle acque.
Prof.ssa Elena Selli
- Fotocatalisi su semiconduttori per la depurazione dell'aria.
Prof.ssa Elena Selli

- Studi fluorimetrici sulla complessazione di metalli nei sistemi acquatici.

Prof.ssa Elena Selli

CATALISI E PROCESSI INDUSTRIALI

- Preparazione di catalizzatori eterogenei nanostrutturati, acidi e superacidi, con attività di interesse industriale.

Prof.ssa Silvia Ardizzone e Dott. Giuseppe Cappelletti

- Preparazione di catalizzatori eterogenei e loro utilizzo nella sintesi di Fischer-Tropsch ($H_2 + CO$). Gestione di un impianto ad alta temperatura, sotto pressione.

Prof.ssa Claudia Bianchi e Dott. Carlo Pirola

- Reazioni di esterificazione in condizioni non-classiche

Prof.ssa Claudia Bianchi e Dott. Carlo Pirola

- Metodi innovativi per la caratterizzazione di catalizzatori solidi impiegati in reazioni condotte in acqua o altri solventi benigni

Prof. Paolo Carniti

- Modellizzazione cinetica di reazioni catalitiche complesse

Prof. Paolo Carniti

- Nuovi catalizzatori ad anima metallica per reazioni esotermiche anche di interesse ambientale

Prof. Paolo Carniti

- Sintesi di carboni attivi, modificazioni e caratterizzazione chimico-fisica.

Prof. Leonardo Formaro e Dott.ssa Mariangela Longhi

- Caratterizzazioni di proprietà superficiali e massive di catalizzatori solidi con tecniche di tipo spettroscopico (DRS-UV, FT-IR), termiche (TPD, TPR/TPO, TGA) e di adsorbimento gas-solido e liquido-solido).

Prof.ssa Antonella Gervasini

- Catalisi acida: reazioni di isomerizzazione, alchilazione e acilazione di substrati organici con reattori batch, continui e a ricircolo.

Prof.ssa Antonella Gervasini

- Sviluppo di nuovi materiali catalitici con metodologie sintetiche innovative con tecniche sol-gel, adsorbimento, precipitazione sotto controllo di pH, ecc.). In particolare, vengono sviluppati catalizzatori ossidici costituiti da ossidi metallici (Cu, Fe, Mo, Nb; ecc.) altamente dispersi in dimensione nanometrica su ossidi ceramici con funzione di supporto (SiO_2 , ZrO_2 , TiO_2 , e loro composizioni miste).

Prof.ssa Antonella Gervasini

- Studio, mediante spettroscopia EPR/FMR, della relazione tra proprietà catalitiche di ossidi misti con struttura perovskitica e loro proprietà para- e ferro-magnetiche.

Prof. Cesare Oliva

- Studio, mediante spettroscopia EPR/FMR, della relazione tra proprietà foto-catalitiche di sistemi derivati da TiO_2 e loro proprietà para- e ferro-magnetiche.

Prof. Cesare Oliva

- Preparazione e caratterizzazione di materiali elettrocatalitici a base di metalli e ossidi metallici
Prof.ssa Sandra Rondinini e Dott. Alberto Vertova
- Caratterizzazione di catalizzatori a base di ossidi misti mediante TPD-TPR.
Dott.ssa Ilenia Rossetti
- Preparazione di materiali nano strutturati mediante pirolisi in fiamma.
Dott.ssa Ilenia Rossetti
- Deidrogenazione ossidativa di paraffine leggere.
Dott.ssa Ilenia Rossetti
- Studio cinetico della reazione di hydrocracking di n-paraffine a catena lunga.
Dott.ssa Ilenia Rossetti
- Fotocatalisi su semiconduttori: nuovi fotocatalizzatori ad ampia sensibilità.
Prof.ssa Elena Selli
- Aspetti meccanicistici dei processi di trasferimento elettronico in fotocatalisi.
Prof.ssa Elena Selli
- Elettrocatalisi: Produzione, studio e caratterizzazione di materiali catalitici verso reazioni elettrochimiche di interesse industriale.
Prof. Sergio Trasatti
- Sviluppo ed implementazione di metodi sintetici per materiali elettrocatalitici.
Prof. Sergio Trasatti

CORROSIONE e METALLURGIA

- Studio dell'influenza della microstruttura e di componenti intermetallici sul comportamento a corrosione di acciai inossidabili duplex.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti
- Comportamento a corrosione di leghe commerciali in ambienti organici e fluidi di processo industriali.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti
- Utilizzo di tecniche analitiche e spettroscopiche nello studio di fenomeni di corrosione.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti
- Analisi delle caratteristiche di aggressività di fluidi petroliferi a base naftenica.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti
- Studio del comportamento di acciai innovativi destinati all'utilizzo in camera di combustione ed impianti di potenza, in presenza di agenti aggressivi allo stato gassoso e come sali fusi.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti
- Resistenza a corrosione di acciai ad alto limite di snervamento per impieghi nell'industria petrolifera.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti

- Analisi del rumore elettrochimico nello studio della corrosione umida; applicazione dell'analisi del rumore elettrochimico come tecnica di monitoraggio e controllo di fenomeni di corrosione di materiali metallici in soluzioni acquose.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti
- Sviluppo di rivestimenti organici a base silano per la protezione delle leghe di alluminio.
Prof. Enrico Sivieri e Dott. Stefano Trasatti

SCIENZE DELLA VITA

- Preparazione e caratterizzazione, mediante tecniche spettroscopiche di superficie, di materiali biocompatibili
Prof.ssa Claudia Bianchi
- Caratterizzazione elettrochimica di supporti e molecole (monomeri e polimeri) utilizzati per lo sviluppo di biosensori per acidi nucleici (DNA) e proteine.
Dott. Luigi Falciola
- Preparazione e caratterizzazione di nanoparticelle di SiO₂
Prof. Leonardo Formaro e Dott.ssa Mariangela Longhi
- Coniugati tra PNA e gruppi redox attivi per lo sviluppo di biosensori: relazioni tra struttura e attività redox.
Prof.ssa Patrizia Mussini
- Studio e sviluppo di polipeptidi con attività anti angiogenica.
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini
- Design in silico di molecole con proprietà antimitotiche
Prof. Maurizio Sironi e Dott. Stefano Pieraccini