



ALMA MATER STUDIORUM  
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

# Area di Chimica Fisica

## Dipartimento di Chimica Industriale «Toso Montanari»

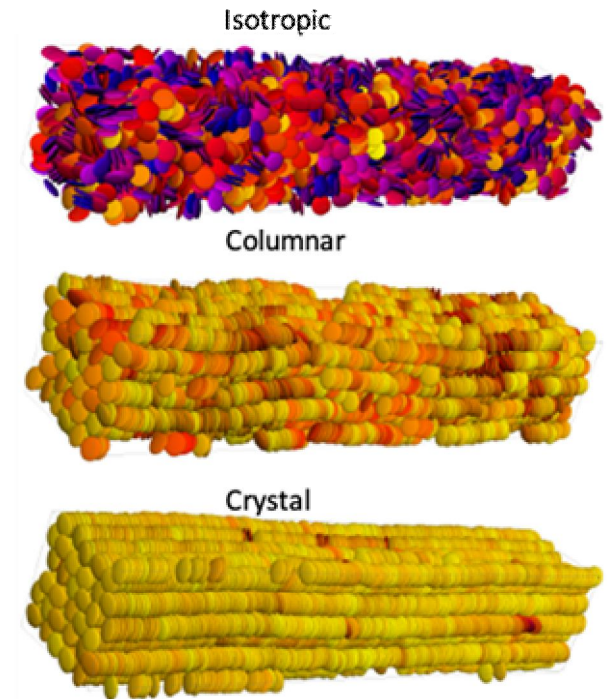
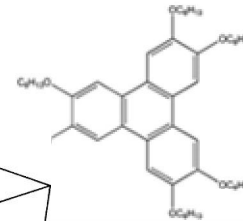
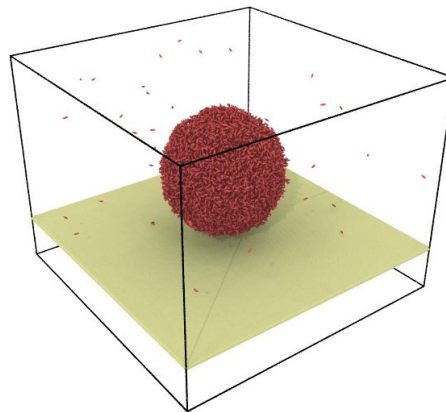
# Simulazioni di materiali «soffici» con modelli a scala molecolare

Prof. Alberto Arcioni, Luca Muccioli, **Silvia Orlandi** s.orlandi@unibo.it

Chimica computazionale

Parole chiave:

- Modellazione molecolare
- Cristalli liquidi
- Liquidi ionici
- Oligomeri di DNA
- Autoassemblaggio
- Diagrammi di fase
- Film e superfici
- Formazione di gocce
- Effetto di spigoli e altre forme geometriche

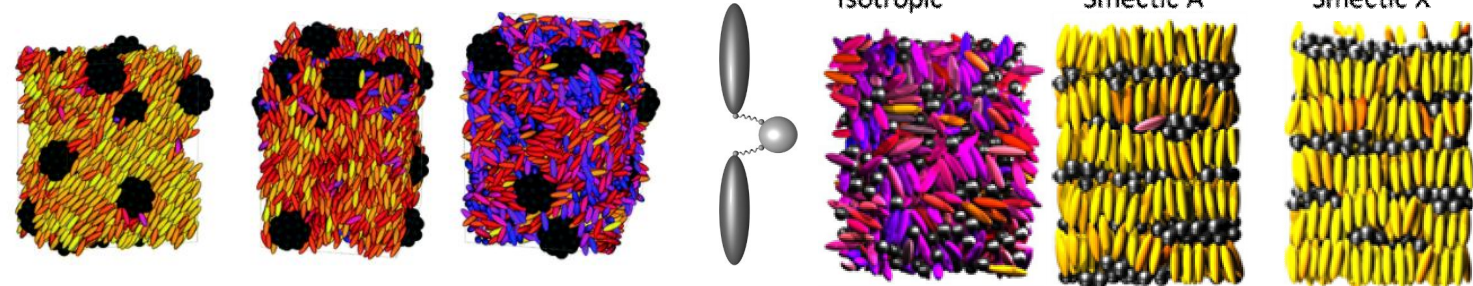
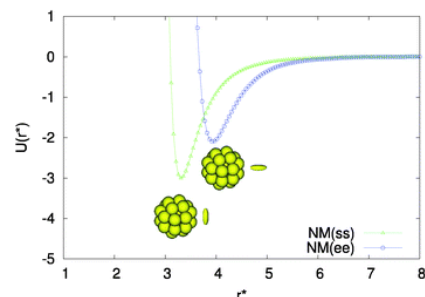


Riferimenti:

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/SM/C7SM02459B>

<https://doi.org/10.1080/02678292.2018.1528641>

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/CP/C5CP05754J>



# Simulazioni Molecular Dynamics di semiconduttori organici

Prof. Alberto Arcioni, Silvia Orlandi, **Luca Muccioli** luca.muccioli@unibo.it

Chimica computazionale

Parole chiave:

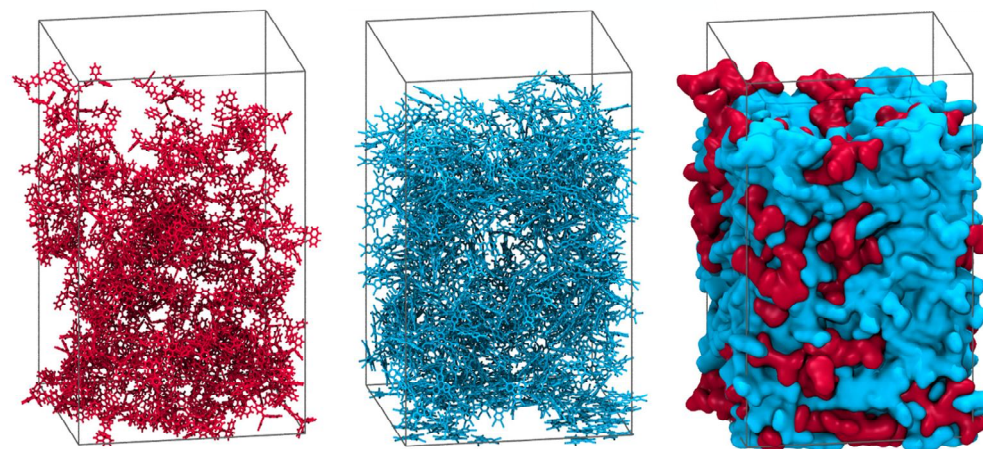
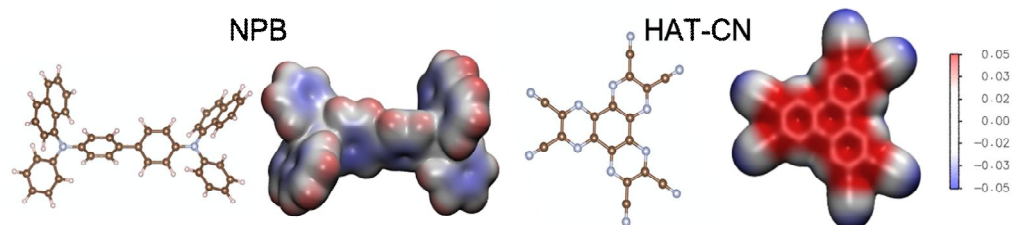
- Modellazione molecolare
- OLED
- Celle solari organiche
- Proprietà elettroniche
- Trasporto di carica
- Deposizione dal vapore
- Film e superfici
- Autoassemblaggio

Riferimenti:

<https://doi.org/10.1021/acsnano.9b07671>

<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b02882>

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcclett.8b03063>



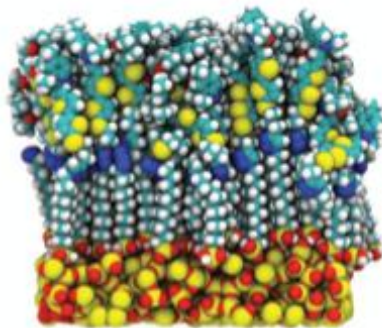
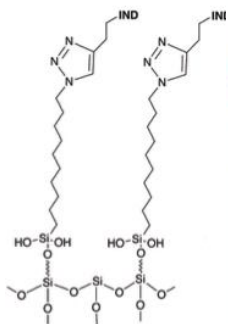
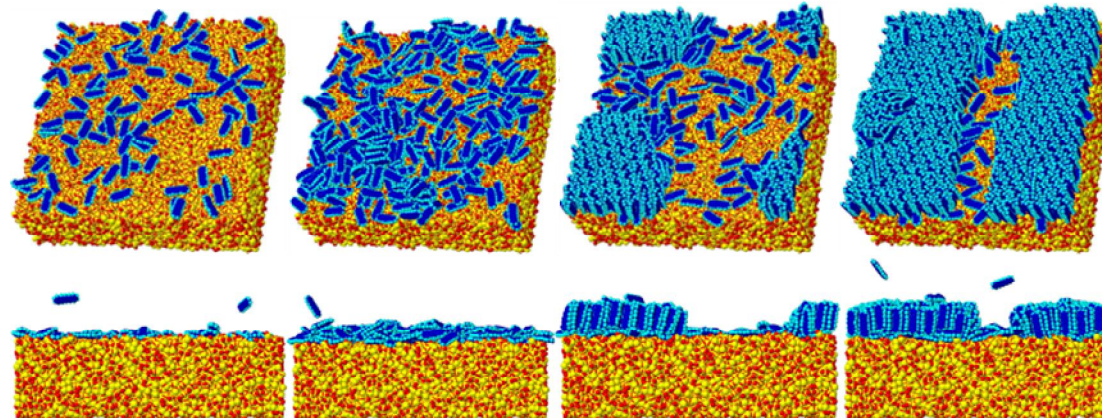
vapor deposition

100 molecules

300

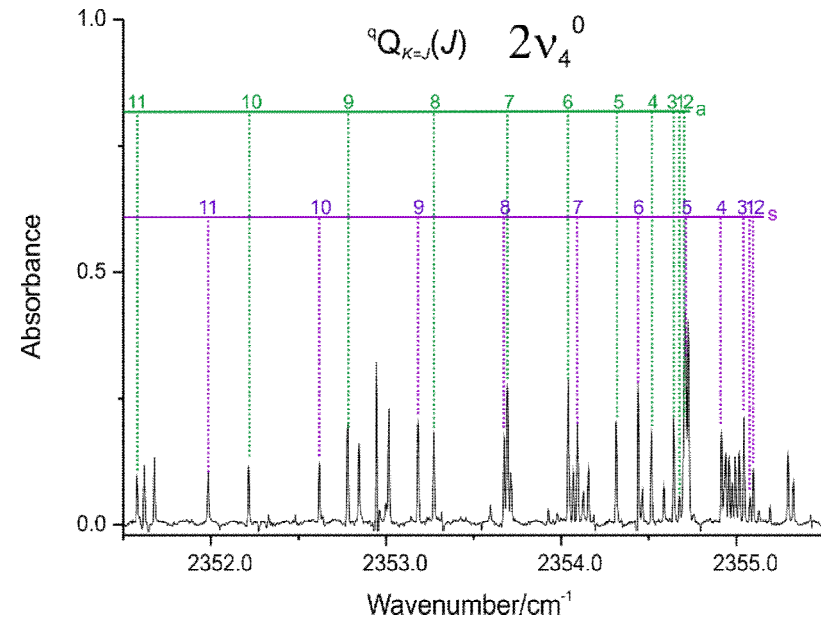
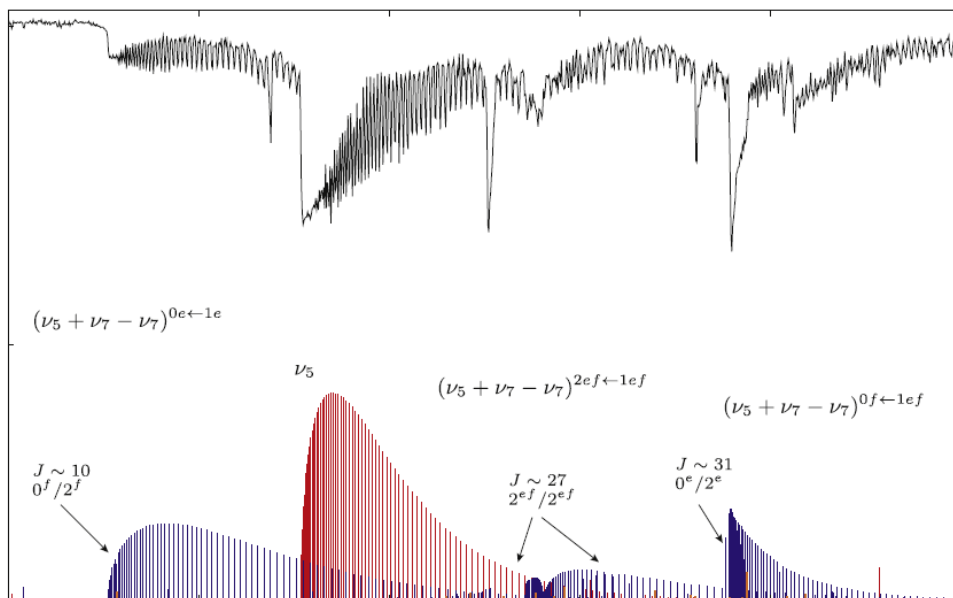
500

1100



# Spettroscopia molecolare ad alta risoluzione

Filippo Tamassia, Elisabetta Cané



# QUALI MOLECOLE STUDIARE?

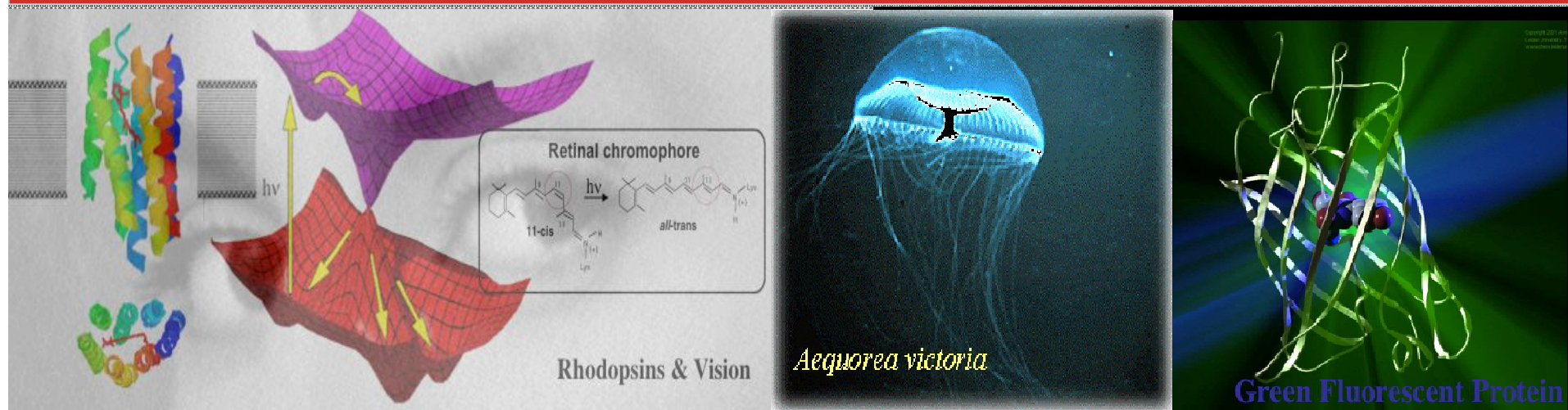
- In genere, molecole di interesse astrofisico o atmosferico ( $\text{HC}_3\text{N}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{F}_2$ ,  $\text{C}_2\text{HF}_3$ , ...)

# COSA FARE?

- Registrazione di spettri vibro-rotazionali e rotazionali di molecole in fase gassosa.
- Analisi degli spettri per mezzo di programmi di calcolo.
- Determinazione dei parametri spettroscopici delle molecole studiate.

# Modellistica di processi fotoindotti e spettroscopici

Gruppo di ricerca: Fotochimica e spettroscopia computazionale  
(Prof. Marco Garavelli)



Il lavoro di tesi si propone di modellare, attraverso tecniche computazionali avanzate, la fotochimica, fotofisica e spettroscopia di cromofori organici e biologici, nonché di progettare materiali molecolari *SMART* fotoattivi per applicazioni in ICT e nanotecnologia.

[Per informazioni rivolgersi al Prof. Marco Garavelli](#)

[marco.garavelli@unibo.it](mailto:marco.garavelli@unibo.it) ([www.unibo.it/docenti/marco.garavelli](http://www.unibo.it/docenti/marco.garavelli))

Chemical Science

PERSPECTIVE

View Article Online  
View Journal | View Issue

Check for updates

Two-dimensional UV spectroscopy: a new insight into the structure and dynamics of biomolecules

Cite this: *Chem. Sci.*, 2019, 10, 9907

J | A | C | S

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Ultrafast Spectroscopy: State of the Art and Open Challenges

Perspective

Cite This: *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142, 3–15

pubs.acs.org/JACS

CHEMICAL REVIEWS

Quantum Chemical Modeling of the Photoinduced Activity of Multichromophoric Biosystems

Focus Review

Cite This: *Chem. Rev.* 2019, 119, 9361–9380

pubs.acs.org/CR

Disponibili sia tesi Triennnali che Magistrali

Disponibili Dottorati di Ricerca

Gruppo di ricerca di

# CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO

Perché **STATO SOLIDO**?

Il nostro lavoro si focalizza sull'analisi della materia in stato solido, cioè polveri...

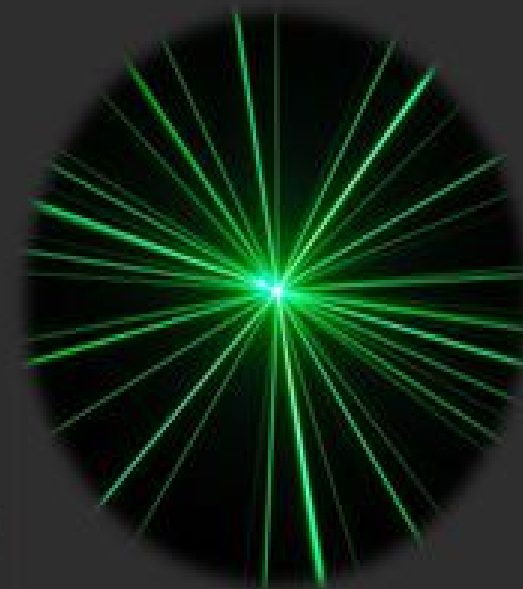


... oppure cristalli molecolari.



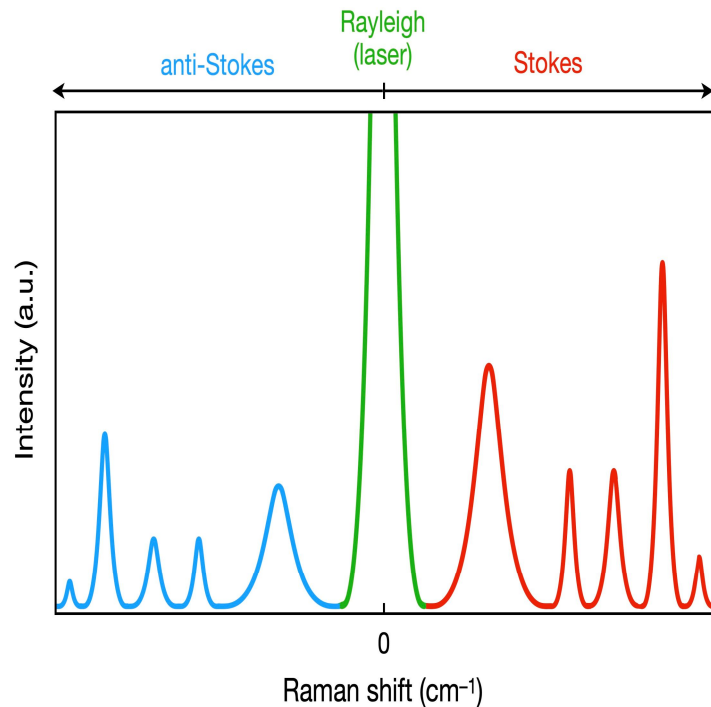
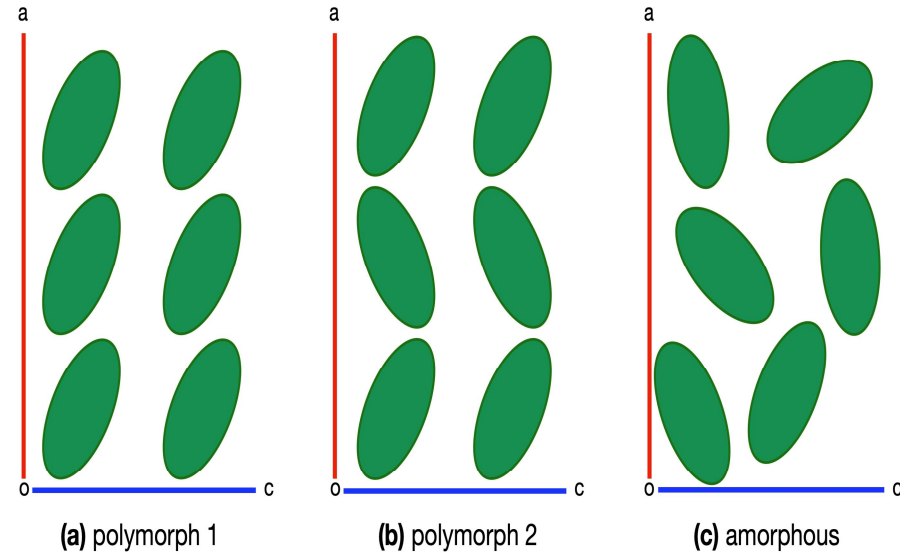
Perché **CHIMICA FISICA**?

Perché sfruttiamo l'interazione energia-materia per ottenere informazioni circa le proprietà di un materiale.



Allo stato solido, le singole molecole si possono disporre in più maniere all'interno del reticolo cristallino.

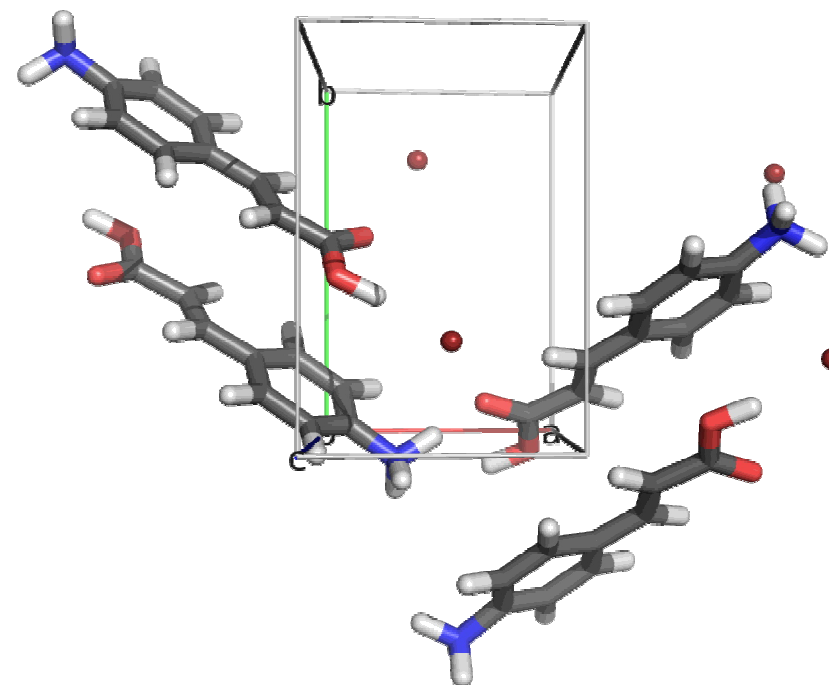
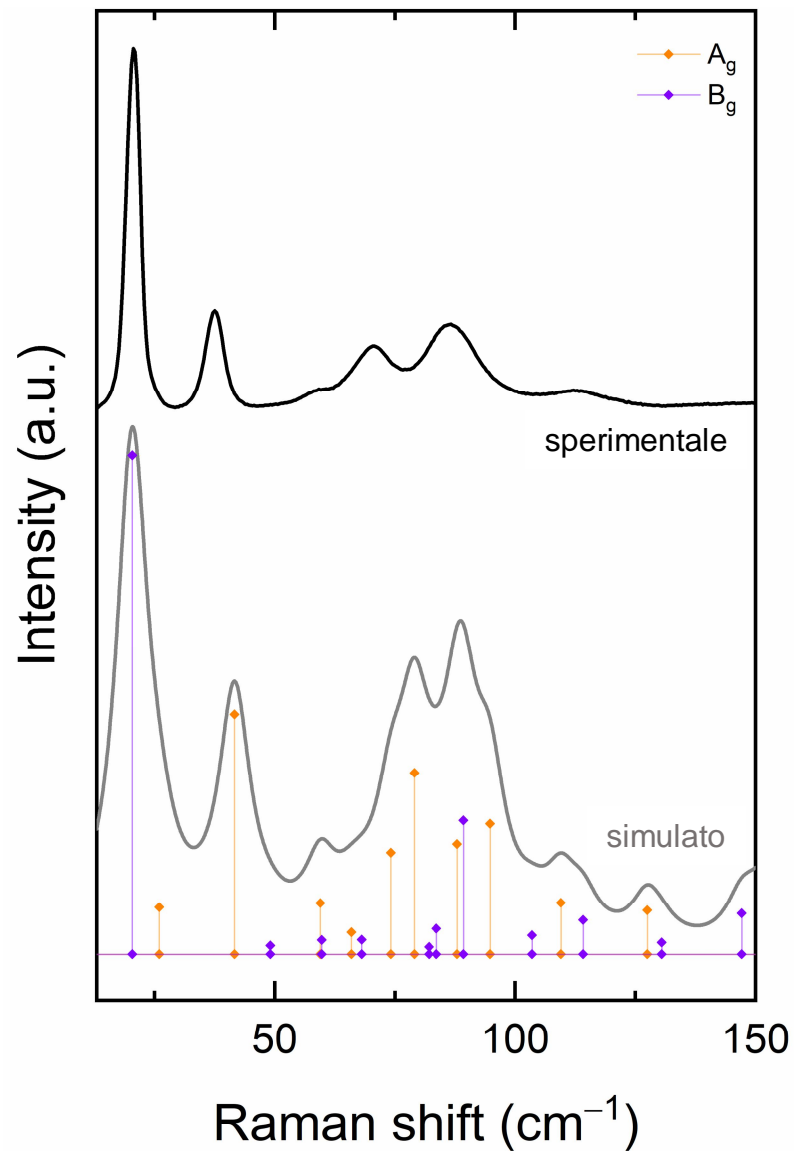
Questo fenomeno prende il nome di **POLIMORFISMO**.



La **spettroscopia Raman** a bassi numeri d'onda è lo strumento principale che usiamo per studiare il polimorfismo, perché ci consente di capire come le molecole sono disposte nel reticolo cristallino.







Il nostro gruppo si avvale anche di **metodi computazionali e simulazioni** al computer per affiancare le misure sperimentali.

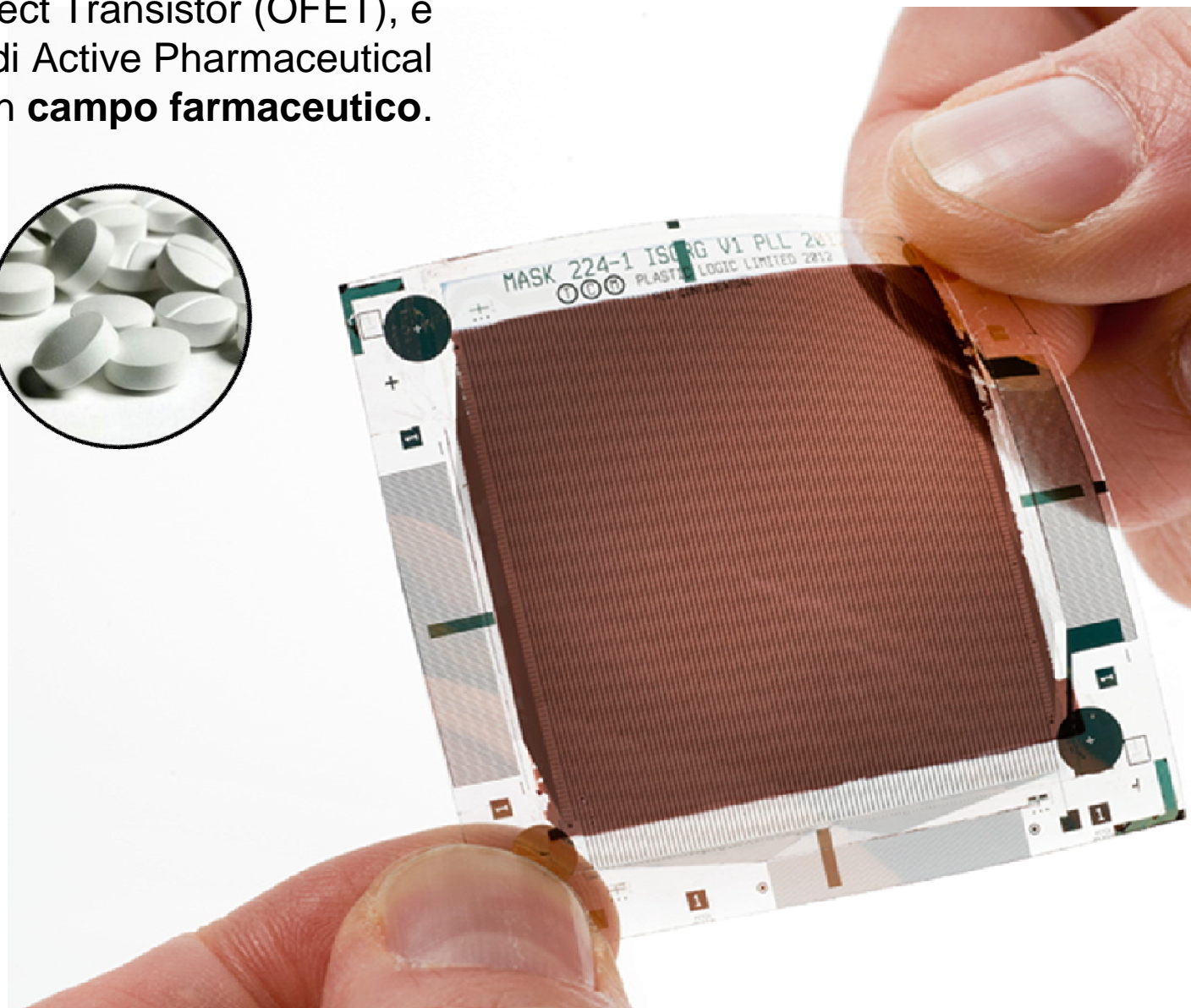
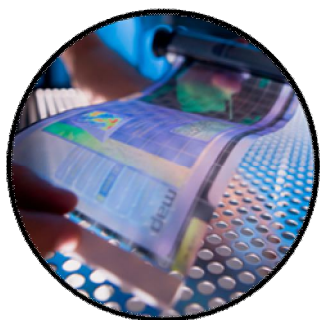


GAMMESS

MOLDEN



Troviamo applicazione nel settore dell'**elettronica organica**, con la produzione di Organic Field Effect Transistor (OFET), e polymorph screening di Active Pharmaceutical Ingredient (API) in **campo farmaceutico**.



# Contatti:



Prof. Elisabetta Venuti  
[elisabetta.venuti@unibo.it](mailto:elisabetta.venuti@unibo.it)



Prof. Raffaele G. Della Valle  
[raffaele.dellavalle@unibo.it](mailto:raffaele.dellavalle@unibo.it)



Prof. Aldo Brillante  
[aldo.brillante@unibo.it](mailto:aldo.brillante@unibo.it)



Ph.D. Tommaso Salzillo  
[tommaso.salzillo@unibo.it](mailto:tommaso.salzillo@unibo.it)



Ph.D. Arianna Rivalta  
[arianna.rivalta2@unibo.it](mailto:arianna.rivalta2@unibo.it)



Andrea Giunchi  
[andrea.giunchi8@unibo.it](mailto:andrea.giunchi8@unibo.it)



Lorenzo Pandolfi  
[lorenzo.pandolfi4@unibo.it](mailto:lorenzo.pandolfi4@unibo.it)

## Tesi recenti:

- “Il polimorfismo del paracetamolo: indagine mediante spettroscopia Raman e metodi computazionali” (2015)
- “Il semiconduttore organico perilene-tetracianoquinodimetano e i suoi nuovi derivati fluorurati: uno studio teorico” (2015)
- “Studio spettroscopico del polimorfismo dei semiconduttori organici indaco e tioindaco” (2016)
- “Metodi computazionali per la descrizione dei cristalli molecolari: strategie di utilizzo e sistemi modello” (2017)
- “Caratterizzazione Raman di pigmenti organici: 6,6'-dibromoindigo e chinacridone” (2017)
- “Studio dei polimorfi del nabumetone mediante analisi in spettroscopia Raman” (2019)
- “Funzionalizzazione e caratterizzazione di pigmenti organici per applicazioni in transistor a effetto di campo” (2019)
- “Studio mediante spettroscopia vibrazionale di foto-dimerizzazioni [2+2] in cristalli molecolari” (2019)

Dipartimento di Chimica Industriale  
"Toso Montanari"



ALMA MATER STUDIORUM  
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Area CHIM/02

Gruppo di Ricerca:

Spettroscopia e Chimica Computazionale

#### Contatti:

Email: [i.rivalta@unibo.it](mailto:i.rivalta@unibo.it)

<https://www.unibo.it/sitoweb/i.rivalta/>

# Modelli per i segnali chimici nelle proteine

Prof. Ivan Rivalta

Gli studi proposti riguardano i meccanismi di propagazione dei segnali chimici che sono ubiquitari ed essenziali nei processi biologici. Vengono sviluppati ed applicati metodi computazionali avanzati basati su teoria delle reti e tecniche di intelligenza artificiale che permettono l'analisi delle dinamiche complesse nei sistemi proteici. La caratterizzazione dei suddetti meccanismi in sistemi di particolare rilevanza biologica (come enzimi, proteine di membrana, e macchine molecolari tipo recettori nucleari, sistemi CRISPR-Cas9 e spliceosoma) viene infine utilizzata per il design di nuove molecole di interesse farmacologico.



## Publicazioni selezionate:

Exploring allosteric pathways of a v-type enzyme with dynamical perturbation networks, *Journal of Physical Chemistry B* 123 (16):3452-3461

Eigenvector centrality for characterization of protein allosteric pathways, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2018, 115 (52), E12201-E12208

Protospacer Adjacent Motif-Induced Allostery Activates CRISPR-Cas9, *Journal of the American Chemical Society* 2017, 139 (45), 16028-16031.

Allosteric Pathways in the PPAR $\gamma$ -RXR $\alpha$  nuclear receptor complex, *Scientific Reports*, 2016, 6, 19940

Allosteric pathways in imidazole glycerol phosphate synthase, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2012, 109, E1428-E1436.

**Sono disponibili progetti di ricerca per Tesi di Laurea Triennale, Magistrale e per Dottorati di Ricerca**