



CHIMICA  
PASSIONE  
PERIODICA

# 5. BIG DATA MODELLI PREDITTIVI, SIMULAZIONE, ANALISI

**GIOVEDÌ 8 NOVEMBRE 2018**

**L'uso dei big data per  
l'analisi chimica e la  
simulazione numerica  
di molecole e materiali**



UN PROGETTO DI



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI TORINO



IN COLLABORAZIONE CON

**frida** FORUM  
DELLA RICERCA  
DI ATENE



agorà scienza



## Chimica / Passione Periodica

Nell'ambito delle attività di divulgazione della ricerca del Dipartimento di Chimica, siamo orgogliosi di accogliervi alla quarta giornata dell'iniziativa "Chimica: passione periodica".

Il ciclo di conferenze divulgative si articola in sei workshop tematici che avranno luogo ogni primo giovedì del mese, da maggio a dicembre 2018 (3 maggio, 7 giugno, 5 luglio, 4 ottobre, 8 novembre e 6 dicembre).

Con questa importante iniziativa, vogliamo presentare alla società, all'industria e al mondo accademico la nostra ricerca di punta, con l'intento di promuovere percorsi comuni su grandi temi trasversali di interesse collettivo, in un ambiente informale.

Dalla sicurezza alimentare alle tecniche innovative per i beni culturali, dall'energia pulita alla chimica applicata all'investigazione criminale, dalla chimica "green" alla diagnostica medica, il ciclo di conferenze sarà occasione per avviare un dialogo tra i nostri ricercatori e gli attori sociali e produttivi che operano nel settore.

Presenteremo le nostre strategie di sviluppo di materiali intelligenti e nanostrutturati, incluse simulazioni e modelli predittivi, nel contesto di Industria 4.0.

Per favorire la nascita di nuove interazioni, al termine di ogni pomeriggio abbiamo previsto uno spazio di discussione progettuale aperto e un aperitivo scientifico.

Ringraziandovi per aver partecipato a questa quarta giornata, vi invitiamo ad iscrivervi alle prossime date di vostro interesse inquadrando il QR code con il vostro cellulare o all'indirizzo <http://www.chimica-ricerca.unito.it>.

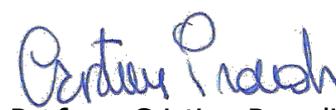
La registrazione online è aperta.



Il Direttore del Dipartimento di Chimica

  
Prof. Marco Vincenti

La viceDirettrice alla Ricerca

  
Prof.ssa Cristina Prandi

## Descrizione della giornata

La rivoluzione digitale è sotto i nostri occhi ogni giorno. Basta accendere un computer, entrare in internet e trovarsi immersi in quelli che sono chiamati i big data, che permettono di manipolare grandi moli di dati per dare risposte a ogni tipo di problema.

Vi chiederete: "Che cosa c'entrano i big data con la chimica?". C'entrano eccome, il chimico moderno infatti non è solo più colui che lavora in laboratorio con camice e occhiali protettivi. In questo evento, vogliamo trasmettervi un po' della nostra passione per i "big, medium and small" data con cui lavoriamo tutti i giorni: i numeri. Fare chimica con i numeri è un gioco di prestigio che la messa a punto di modelli di predizione accurati, l'avvento di calcolatori e supercalcolatori e lo sviluppo di efficienti programmi di calcolo e simulazione ha trasformato i nostri laboratori in laboratori virtuali.

Oggi, l'innovazione nella chimica passa anche attraverso la computazione. Parafrasando Marinetti, ideatore del futurismo, "La magnificenza del mondo si è arricchita di una bellezza nuova: la bellezza della chimica computazionale".

Programma

*Chairperson della giornata: B. Civalleri*

*14.00: Presentazione dell'iniziativa /Cristina Prandi (Vice Direttore alla Ricerca)*

*Presentazione del Dipartimento /Marco Vincenti (Direttore)*

*14.10: Presentazione della giornata / Bartolomeo Civalleri*

*14.25: L'evoluzione delle piattaforme e dei sistemi ad alte prestazioni: da HPC ai Big Data al Deep Learning / Marco Aldinucci*

*14.40: CRYSTAL: un laboratorio virtuale per la scienza dei materiali e le nanotecnologie / Lorenzo Maschio*

*14.55: Trasporto di farmaci: ruolo della simulazione al calcolatore / Piero Ugliengo*

*15.10: Reattività molecolare: dalla chimica computazionale a quella sperimentale / Andrea Maranzana*

*15.25: Coffee break*

*15.55 Tecniche sperimentali e computazionali per lo studio di sistemi complessi / Alessandro Damin*

*16.10: Chemiometria e "big data analysis": dai dati grezzi allo sviluppo di software applicativi / Marco Vincenti*

*16.25: In equilibrio tra le fasi / Marcello Baricco*

*16.40: Modellizzazione di eterostrutture come sensori di gas per applicazioni in ambito automobilistico / Anna Maria Ferrari*

*16.55: Magneti permanenti per motori elettrici, il ruolo della chimica teorica nella ricerca di nuovi materiali a basso contenuto di terre rare / Mauro Sgroi, Centro Ricerche FIAT*

*17.10: Università e Azienda: progetti software come opportunità di collaborazione / Gianpaolo Perego, Aethia s.r.l.*

*17.25: Aperitivo e sessione poster.*



# Interventi





Note Primo Intervento

## L'evoluzione delle piattaforme e dei sistemi ad alte prestazioni: da HPC ai Big Data al Deep Learning

*Marco Aldinucci, Dipartimento di Informatica, Università di Torino*

Abstract – “*La mathématique est l’art de donner le même nom à des choses différentes*” [Poincaré]. L’informatica eredita dalla matematica il metodo di astrazione e lo elegge a principio fondamentale.

L’informatica si evolve per astrazioni successive. Oggi, dopo 30 anni di letargo, anche il calcolo ad alte prestazioni (HPC) si sta estendendo oltre i tradizionali campi di applicazione. Per anni i sistemi HPC si sono nutriti di equazioni differenziali; la capacità di calcolare moltissime operazioni matematiche per secondo (FLOPS) è stata la chiave per risolvere problemi sempre più grandi e per trovare soluzioni sempre più precise. L’esplosione dei dati conseguente alla trasformazione digitale ha spostato la domanda di alte prestazioni dalle applicazioni tradizionali (equazioni, simulazioni, etc.) ai metodi per l’analisi di grandi quantità di dati (BigData, Deep Learning, etc). Sotto questa spinta, i modelli di programmazione e di fruizione dei sistemi HPC si stanno evolvendo verso modelli molto più astratti, in grado di soddisfare esigenze applicative diverse e di semplificare lo sviluppo di nuove applicazioni. Le sfide per i progettisti si rinnovano: dai FLOPS alla gestione efficiente dei dati in memoria; dai modelli di programmazione a basso livello di astrazione basati su send-recv alla composizione di micro-servizi per il riuso del software; dalla matematica in precisione doppia a quella in precisione infima ma efficiente per le reti neurali profonde; dalle code di job alla schedulazione di istanze multiple isolate di sistema operativo (dockers).

ABSTRACTION - EXAMPLE



Great politicians with beautiful hair

Una botta di vita per gli studiosi di sistemi ad alte prestazioni: sperimentare nuovi carichi di lavoro, piattaforme, modelli di programmazione, modelli di fruizione. Per raccogliere questa sfida l’università di Torino ha aperto due grandi iniziative finanziate da due progetti competitivi: il *Centro di Competenza per il Calcolo Scientifico (C3S)*, finanziato con 960K€ da compagnia di SanPaolo e il centro Torinese di *High-Performance Computing for Artificial Intelligence (HPC4AI)*, federato con POLITO e finanziato con 4.5M€ mediante il programma FERS 2014-20 INFRA-P. C3S dispone di un cluster eterogeneo (chiamato OCCAM) con 1200 core, 1PB di storage e 8 GPU e serve le esigenze di calcolo di oltre 16 dipartimenti. Occam implementa un modello di fruizione basato su Linux container (docker) progettato a UNITO [1]. HPC4AI estende C3S con molti più nodi e con un modello ancora più astratto di fruizione basato sulla federazione di sistemi cloud nettamente orientati verso i workload Big Data e AI [2]. La presentazione intende introdurre C3S e HPC4AI, il loro scopo, i progetti in corso e loro sfide scientifiche.

([marco.aldinucci@unito.it](mailto:marco.aldinucci@unito.it))

[1] M. Aldinucci et al, “OCCAM: a flexible, multi-purpose and extendable HPC cluster,” in *Journal of Physics: Conf. Series 898 (CHEP 2016)*, San Francisco, USA, 2017.

[2] M. Aldinucci et al “HPC4AI, an AI-on-demand federated platform endeavour,” in *ACM Computing Frontiers*, Ischia, Italy, 2018

Note Secondo Intervento

CRYSTAL: un laboratorio virtuale per la scienza dei materiali e le nanotecnologie.

*L. Maschio, B. Civalleri, S. Casassa, R. Dovesi, A. Erba*

Quando si pensa all'incredibile progresso della capacità di calcolo in ambito scientifico negli ultimi decenni, spesso ci si tende a concentrare sull'impressionante sviluppo dell'hardware, sui supercalcolatori con milioni di processori, sulle architetture innovative. Si corre il rischio di dimenticare il ruolo, altrettanto fondamentale, del software, che costituisce l'altra inscindibile metà del calcolo.

Fin dagli anni '70 del secolo scorso all'interno del nostro Dipartimento di Chimica si sviluppa CRYSTAL, un programma utilizzato oggi da centinaia di laboratori di ricerca pubblici e privati in tutto il mondo. CRYSTAL possiede alcune caratteristiche che lo rendono unico rispetto ad altri software analoghi, ed una di queste è la capacità di sfruttare in modo efficiente le grandi infrastrutture per il calcolo scientifico, fino a decine di migliaia di processori per un singolo calcolo.

CRYSTAL ( [www.crystal.unito.it](http://www.crystal.unito.it) ) permette lo studio a livello quantomeccanico (con tecniche Density Functional Theory, DFT) di materiali, superfici, nanosistemi - come grafene o nanotubi. La possibilità di utilizzare lo stesso programma su di un portatile, su di un piccolo cluster di calcolo o presso di un grande centro di calcolo HPC (High-Performance Computing) offre un enorme vantaggio ai ricercatori, e permette di portare il livello di complessità e di accuratezza della simulazione sempre più vicino alla realtà.

Allo sviluppo di CRYSTAL hanno contribuito, nel corso di oltre quarant'anni, svariate decine di ricercatori provenienti da tutta l'Europa ed oltre. Dalle prime versioni del programma su schede perforate si è raggiunta oggi una dimensione di oltre un milione e mezzo di linee di codice, ed il lavoro continua per aggiungere nuove potenzialità.

Un codice complesso come Crystal è come un albero, che giorno dopo giorno cresce e fiorisce se coltivato e curato nel giusto modo. Con le radici ben piantate nel passato, ed i rami tesi ad afferrare il futuro.

([lorenzo.maschio@unito.it](mailto:lorenzo.maschio@unito.it), [bartolomeo.civalleri@unito.it](mailto:bartolomeo.civalleri@unito.it), [silvia.casassa@unito.it](mailto:silvia.casassa@unito.it), [roberto.dovesi@unito.it](mailto:roberto.dovesi@unito.it), [alessandro.erba@unito.it](mailto:alessandro.erba@unito.it))

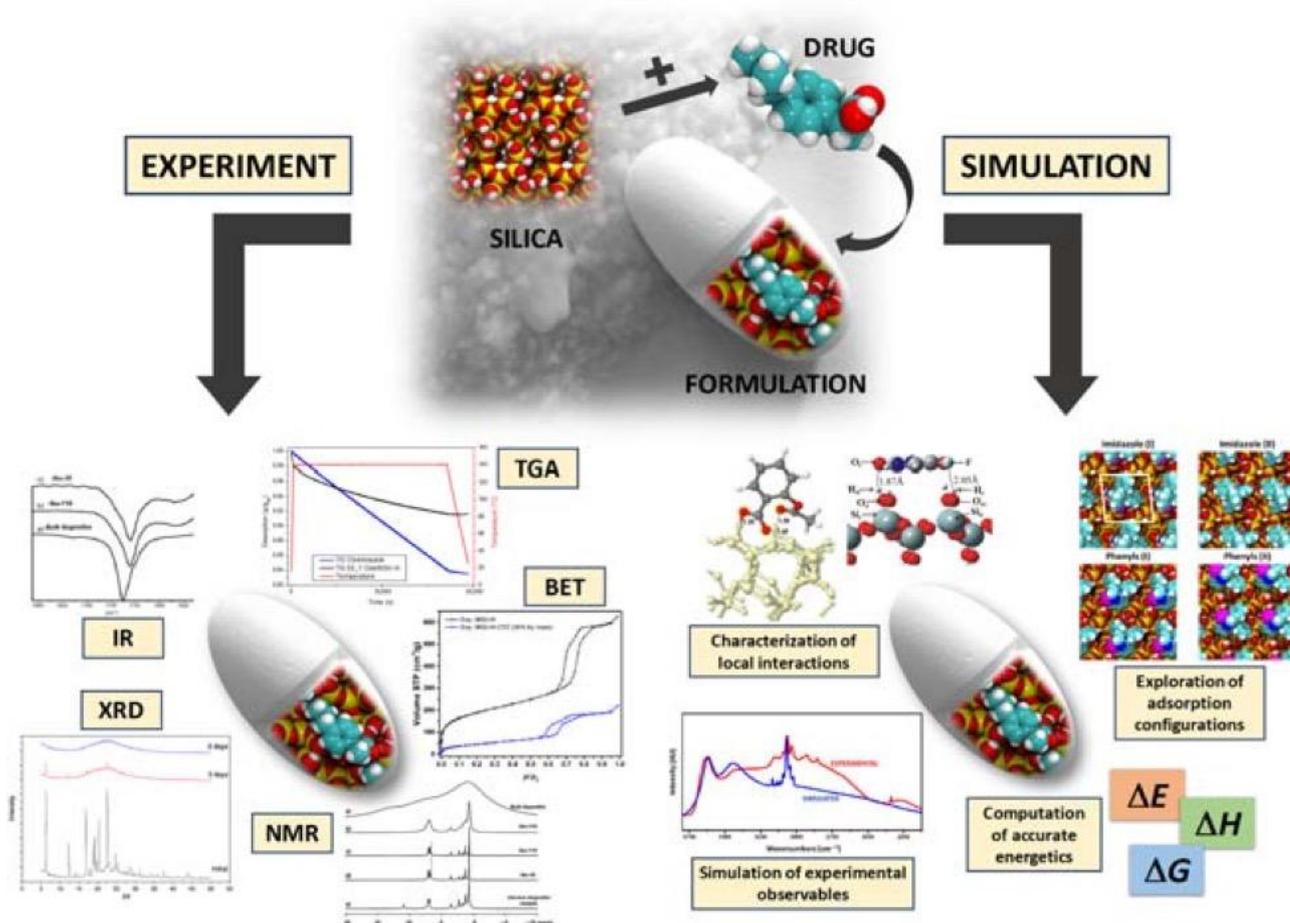


Note Terzo Intervento

## Trasporto di farmaci: ruolo della simulazione al calcolatore

*P. Ugliengo, M. Corno (UPO), M. Delle Piane (Bremen Univ.), B. Onida (Polito), B. Civalleri*

Una formulazione farmaceutica è comunemente composta da due componenti principali: il principio attivo e gli eccipienti. Solitamente definiti come inerti e farmacologicamente inattivi, solo negli ultimi anni è diventato chiaro che gli eccipienti possono iniziare, propagare o partecipare a interazioni chimiche o fisiche con i principi attivi, che potrebbero compromettere la qualità e le prestazioni del prodotto finale. Il biossido di silicio, nella sua forma amorfa, è un comune eccipiente da tavoletta, usato principalmente come agente antigelo e anti-agglomerante. Inoltre, le nanoparticelle di silice mesoporosa sono un possibile agente per la somministrazione e il trasporto di farmaci negli organi bersaglio. Studi dettagliati sulle interazioni farmaco-eccipiente non hanno ancora ricevuto molta attenzione a causa delle difficoltà nel comprenderne i dettagli atomistici. La chimica computazionale e la modellistica molecolare possono aiutare tale comprensione e fornire indicazioni per la previsione di possibili incompatibilità tra alcuni eccipienti e principio attivo. In questa comunicazione, verrà illustrato come la simulazione quanto meccanica al calcolatore di modelli di interazione tra silice e farmaco possa fornire dati preziosi che servono da complemento a quelli derivati da esperimenti.



Note Quarto Intervento

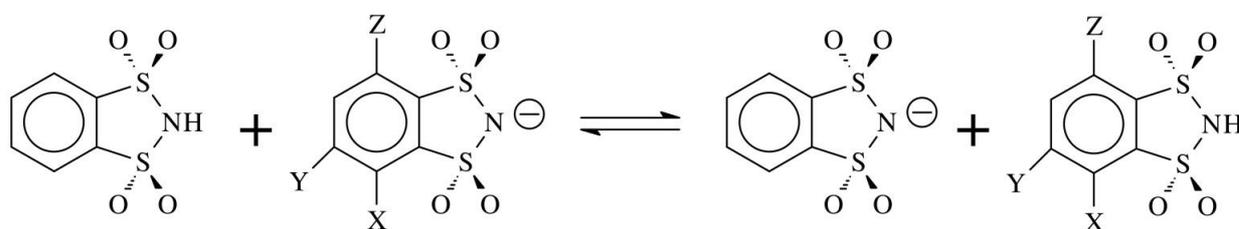
Reattività chimica: dalla chimica computazionale a quella sperimentale.

*P. Antoniotti, G. Ghigo, A. Maranzana, G. Tonachini*

Come avviene la reazione? Perché non ottengo il prodotto che desidero? La mia reazione avverrà se cambio un sostituente? Queste sono domande a cui le simulazioni al computer possono dare una risposta. Oggi, la moderna chimica computazionale consente di simulare la reattività di molecole organiche ed inorganiche aiutando i chimici sperimentali, facendo risparmiare tempo, risorse umane e materiali.

Tra i vari casi studiati, qui ci limitiamo a citarne due:

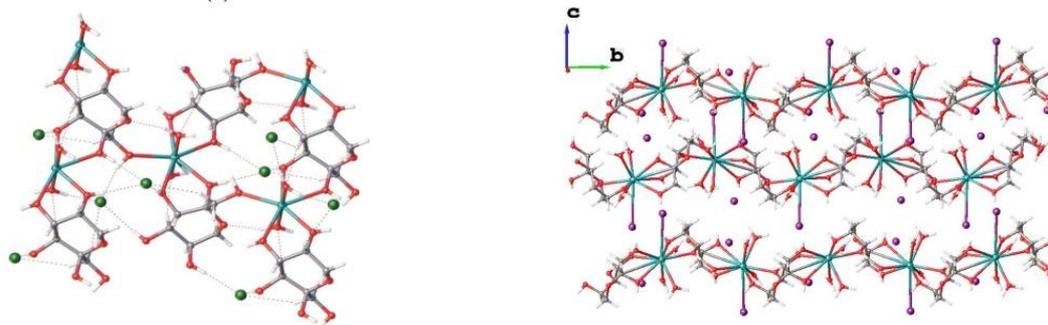
1) L'*o*-benzendisolfonimide è usata come catalizzatore in reazioni organiche catalizzate da acidi di Brønsted. Ai fini della reattività, era utile ottenere derivati più acidi della *o*-benzendisolfonimide, introducendo fino a tre gruppi funzionali (NO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CN, CF<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>). Anziché sintetizzare tutte le combinazioni di molecole per testarne l'acidità, si è ricorso ad una simulazione al computer per stimare la p*K*<sub>a</sub> dell'equilibrio:



da cui è risultato che l'acidità maggiore si ottiene in due casi: quando X=H e Y=Z=NO<sub>2</sub> e quando X=Z=H e Y=NO<sub>2</sub>. Queste sono state le uniche due molecole ad essere sintetizzate e testate come catalizzatori.

2) Nel campo della chimica inorganica un esempio recente riguarda la determinazione mediante calcoli di una proprietà correlata all'emissione di seconda armonica (SHG) al fine di individuare il complesso catione-zucchero-anione con le migliori proprietà SHG, poiché maggiore è l'intensità di emissione di seconda armonica, migliore sarà la rivelabilità delle nanoparticelle nel sistema biologico. Abbiamo quindi determinato l'iperpolarizzabilità di alcuni MOFs (metal organic frameworks) a base di  $\beta$ -D-fruttosio e alogenuri di calcio e stronzio.

Abbiamo dimostrato che tale proprietà è poco influenzata dal tipo di metallo ma aumenta notevolmente aumentando il numero atomico dello ione alogenuro introdotto nel sistema. La sintesi è stata quindi indirizzata verso sistemi contenenti ioduri.



(paola.antoniotti@unito.it; giovanni.ghigo@unito.it; andrea.maranzana@unito.it; glauco.tonachini@unito.it)

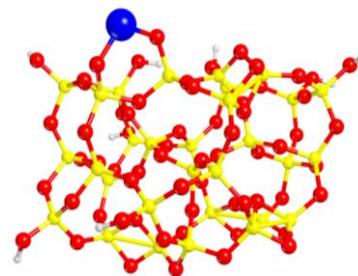
Note Quinto Intervento

## Tecniche sperimentali e computazionali per lo studio di sistemi complessi

*A. Damin, M. Signorile, G. Ricchiardi, S. Bordiga*

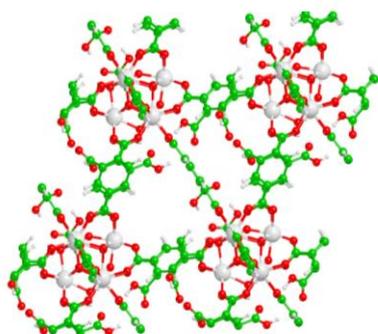
L'impiego sinergico di tecniche sperimentali e computazionali costituisce ad oggi un valido approccio per lo studio e caratterizzazione delle proprietà di materiali complessi. In questo breve intervento verranno illustrate le potenzialità di tale approccio nei confronti di due casi modello.

Nel primo caso verrà illustrato lo studio del catalizzatore Phillips per la sintesi del polietilene (responsabile per circa un terzo della produzione mondiale). Tale sistema è costituito da piccole quantità di Cr (1-2 wt%) disperse alla superficie di un supporto amorfo ad alta area (ad esempio silice, SiO<sub>2</sub>). In passato, tale sistema è stato caratterizzato tramite tecniche spettroscopiche (principalmente vibrazionali ed elettroniche, quindi FT-IR e DR-UV-Vis) nel tentativo di determinare la struttura dei siti Cr responsabili della polimerizzazione dell'etilene, come passo necessario verso una razionale ottimizzazione del catalizzatore. Rimane inoltre poco chiaro il meccanismo di reazione tramite il quale tale reazione avvenga. A tale riguardo è stata quindi sviluppata negli anni una costante attività computazionale, volta principalmente alla costruzione di adeguati sistemi modello (vedere figura a destra) del catalizzatore, con il duplice intento di: i) fornire supporto alla definizione della struttura del sito attivo attraverso il confronto tra dati vibrazionali ed elettronici calcolati con quelli sperimentali; ii) aiutare nella comprensione del meccanismo di reazione.

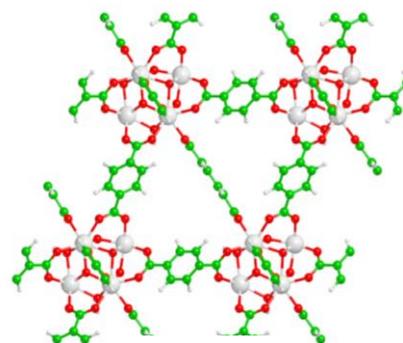


Il secondo caso modello riguarda lo studio di un particolare materiale (qui indicato come UIO66-COOH e derivato dal sistema UIO-66) appartenente ad una variegata classe di sistemi cristallini metallorganici (MOFs, *Metal-Organic Frameworks*) che, essendo caratterizzati da elevata area superficiale e microporosità, risultano essere di grande interesse per

**UIO-66-COOH**



applicazioni nel campo dell'immagazzinamento/purificazione di gas e della catalisi. Nel caso particolare dell'UIO66-COOH, l'impiego sinergico di tecniche sperimentali (principalmente spettroscopia Raman e diffrazione di raggi X) e



**UIO-66**

computazionali (utilizzando il codice CRYSTAL) ha permesso di ottenere utili indicazioni sulla possibile struttura di tale sistema e l'interpretazione di alcuni risultati concernenti il suo processo di sintesi.

([alessandro.damin@unito.it](mailto:alessandro.damin@unito.it); [matteo.signorile@unito.it](mailto:matteo.signorile@unito.it); [gabriele.ricchiardi@unito.it](mailto:gabriele.ricchiardi@unito.it); [silvia.bordiga@unito.it](mailto:silvia.bordiga@unito.it))

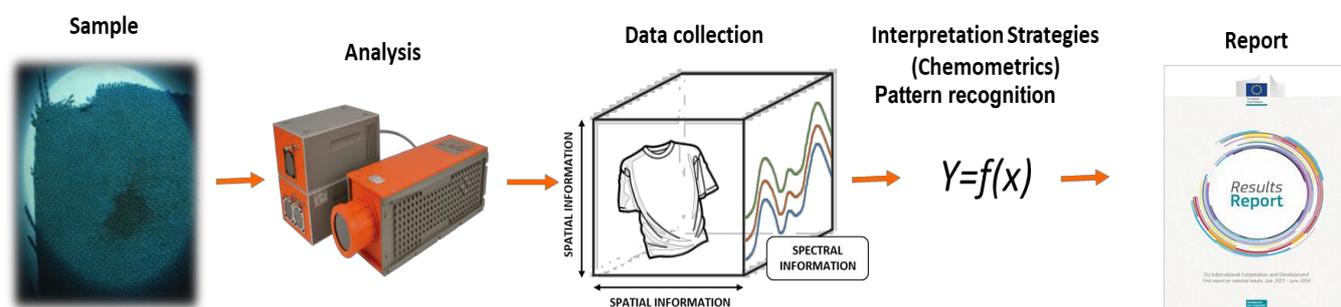
Note Sesto Intervento

Chemiometria e "Big Data Analysis": dai dati grezzi allo sviluppo di software applicativi.

*M. Vincenti, E. Alladio*

I continui sviluppi nei settori delle tecnologie computazionali e delle strumentazioni analitiche e spettroscopiche consentono di mettere a punto metodi in grado di misurare simultaneamente migliaia di composti, parametri e variabili chimico-fisiche e capaci di caratterizzare in maniera approfondita campioni/sistemi in esame, attraverso tempi e costi relativamente limitati. Nel mondo industriale, inoltre, è oramai consolidato l'uso di campionatori automatici, determinazioni in continuo, analitiche o predittive, che si abbina all'elaborazione statistica dei "big data" risultanti.

Questo processo di innovazione ha trovato terreno fertile di applicazione in molteplici settori della chimica quali ad esempio la diagnostica chimico-clinica, il monitoraggio ambientale, l'analisi di materiali, gli studi di speciazione, le scienze forensi. Questa rivoluzione statistico-informatica fondata sui dati grezzi si muove di pari passo con la necessità di sviluppare modelli interpretativi robusti e affidabili. La chemiometria, che è stata definita da uno dei padri fondatori di questa branca, D.L. Massart, come "la disciplina chimica che utilizza tecniche matematiche, statistiche e di logica formale con l'obiettivo di (i) pianificare o selezionare le procedure sperimentali ottimali, (ii) estrarre il quantitativo massimo di informazione chimica mediante l'analisi e l'interpretazione dei dati raccolti e (iii) di costruire un modello conoscitivo del sistema chimico in esame", ben si inserisce nella necessità di fornire modelli predittivi e decisionali di contesto chimico.



La chemiometria è dunque una scienza che utilizza metodi matematico-statistici per la risoluzione di problemi di ambito chimico, ma gli stessi strumenti logico-formali e computazionali su dati multivariati possono essere applicati anche ad altri campi della tecnologia e della scienza. Tipici strumenti chemiometrici adattabili ai problemi in esame comprendono svariati metodi di classificazione, di modellamento e di regressione multivariata, analisi di similarità, metodi di intelligenza artificiale, strategie basate sulle reti neurali, strategie di disegno sperimentale e di ottimizzazione. Per illustrare questi concetti, vengono presentati alcuni esempi relativi all'applicazione della chemiometria a problematiche presentate da differenti gruppi di ricerca afferenti a questo Dipartimento. Essi riguardano lo studio della speciazione chimica, l'analisi di tracce biologiche per scopi forensi, la valutazione di spettri Raman per fini tossicologico-clinici e l'utilizzo di tecniche predittive multivariate in ambito industriale. Verranno infine mostrate alcune metodiche che hanno portato allo sviluppo di software applicativi gratuiti ed open-source, che sono facilmente adattabili a seconda delle problematiche da affrontare.

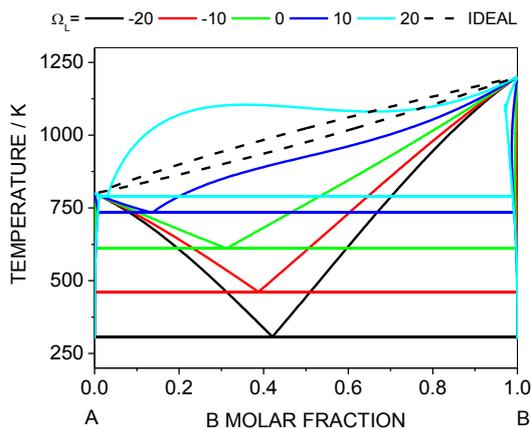
([marco.vincenti@unito.it](mailto:marco.vincenti@unito.it); [eugenio.alladio@unito.it](mailto:eugenio.alladio@unito.it))

Note Settimo Intervento

## In equilibrio tra le fasi

*M.Baricco, L.Battezzati, P.Rizzi, A.Castellero, F.Scaglione, P.Ugliengo, B.Civalleri, C.Nervi*

Una trasformazione di fase, così come una reazione chimica, può avvenire spontaneamente se questa porta ad una riduzione dell'energia libera del sistema. In particolare, la differenza di energia libera tra lo stato iniziale e finale, rappresenta la spinta termodinamica per la nucleazione, spesso indicata come forza motrice per la trasformazione di fase. La velocità con cui avviene una trasformazione di fase, seppur legata agli aspetti termodinamici, è sostanzialmente regolata da parametri cinetici.



*Calcolo di diagrammi di stato binari A-B secondo il modello delle soluzioni regolari, con  $\Omega_S = 30 \text{ kJ mol}^{-1}$  e  $\Omega_L$  con diversi valori, indicati in figura in  $\text{kJ mol}^{-1}$ .  $T_m^A = 800 \text{ K}$ ,  $T_m^B = 1200 \text{ K}$ ,  $\Delta S_m^A = \Delta S_m^B = 10 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . La linea tratteggiata rappresenta il caso di una soluzione ideale.*

L'esistenza di una consistente quantità di dati sperimentali su un particolare sistema permette di usare una procedura di ottimizzazione, che fornisce parametri in grado di descrivere l'energia libera di tutte le fasi in funzione di temperatura, pressione e composizione. Questo obiettivo può essere ottenuto con l'approccio CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams). Le funzioni termodinamiche delle fasi presenti sono ottenute analizzando i dati sperimentali disponibili per alcune proprietà termodinamiche e usando porzioni del diagramma di stato determinate sperimentalmente, portando alla costruzione di opportuni database. Il metodo CALPHAD permette di determinare i diagrammi di fase in accordo con diversi modelli termodinamici disponibili. A titolo di esempio, in figura viene mostrato, nell'ambito del modello delle soluzioni regolari, l'effetto del parametro di interazione nella soluzione liquida ( $\Omega_L$ ) sulla forma del diagramma di fase di un sistema binario generico A-B. Per la descrizione delle soluzioni, sono spesso necessarie informazioni sulla relativa stabilità di elementi e composti in strutture cristalline diverse da quelle stabili alla temperatura ambiente. In questi casi, è possibile fare uso di metodi ab-initio, che permettono di ottenere dati di energia reticolare, che sono inseriti nel database di calcolo.

Il metodo CALPHAD permette la descrizione dell'equilibrio tra le fasi in sistemi multicomponenti di interesse industriale, consentendo, per esempio, la simulazione di trattamenti termici e di processi di solidificazione. Nel corso della presentazione, verranno illustrati alcuni esempi presi dall'esperienza maturata all'interno del Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino. In particolare, saranno mostrati casi di studio in ambito metallurgico (acciai, superleghe, leghe amorfe, leghe preziose, etc.) e per sistemi d'interesse per l'immagazzinamento di idrogeno (idruri metallici e complessi, quali boroidruri e amidi).

([marcello.baricco@unito.it](mailto:marcello.baricco@unito.it))

Note Settimo Intervento

Modellizzazione di eterostrutture come sensori di gas per applicazioni in ambito automobilistico

*A. M. Ferrari*

Note Ottavo Intervento

Magneti permanenti per motori elettrici, il ruolo della chimica teorica nella ricerca di nuovi materiali a basso contenuto di terre rare

*Mauro Francesco Sgroi (Centro Ricerche FIAT)*

La preoccupazione legata al riscaldamento globale sta generando una pressione legislativa a livello mondiale relativa alla riduzione delle emissioni di CO<sub>2</sub> che sta costringendo l'industria automobilistica a trovare soluzioni alternative e più efficienti rispetto ai motori a combustione interna. Allo stesso tempo, le normative sulle emissioni nocive (CO, NO<sub>x</sub>, idrocarburi incombusti, particolato) stanno diventando sempre più stringenti e richiedono sistemi di abbattimento complessi e costosi per rispettare i rigorosi limiti imposti.

I veicoli elettrici a zero emissioni, basati su batterie, sebbene non ancora maturi per una sostituzione completa del motore a combustione interna in applicazioni extraurbane, offrono la possibilità di ridurre contemporaneamente le emissioni nocive e di CO<sub>2</sub>.

I motori elettrici ad alta efficienza per veicoli elettrici ed ibridi richiedono l'uso di magneti permanenti in grado di garantire elevate prestazioni magnetiche (magnetizzazione residua, coercitività, prodotto magnetico) ad alta temperatura (150-200°C).

I materiali attualmente disponibili si basano sull'uso di terre rare pesanti come il disprosio, caratterizzate da un elevato rischio associato alla difficile reperibilità per il mercato Europeo.

Infatti le terre rare sono state inserite dalla Commissione Europea nella lista dei "Critical Raw Materials", materie prime di elevata importanza economica, associata a limitata reperibilità.

Lo sviluppo di magneti permanenti a basso (o nullo) contenuto di terre rare quindi fondamentale favorire l'introduzione di veicoli elettrici e per sostenere l'economia Europea.

Il progetto Novamag, di cui Centro Ricerche FIAT è partner, è dedicato allo sviluppo di nuovi magneti a basso contenuto di terre rare attraverso uno screening computazionale basato su calcoli ab-initio su un vasto insieme di strutture cristalline potenzialmente adatte ad essere utilizzate come materiali magnetici ad alte prestazioni.

Nell'intervento sarà presentata l'attività sul CeFe<sub>11</sub>Ti, materiale magnetico privo di disprosio e neodimio, svolta in collaborazione tra CRF e Università di Torino utilizzando il programma Crystal.

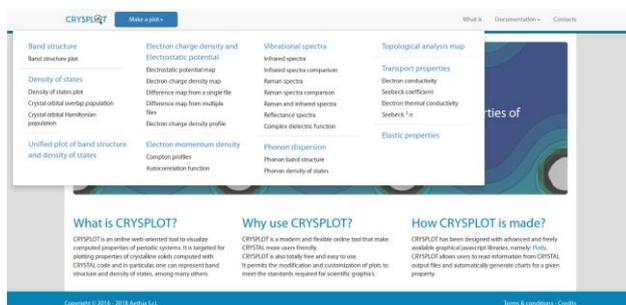
([mauro.sgroi@crf.it](mailto:mauro.sgroi@crf.it))

Note Non Intervento

## Università e Azienda: progetti software come opportunità di collaborazione

*G. Perego (Aethia S.r.l.)*

Progetti di sviluppo e distribuzione di software offrono condizioni ideali per la collaborazione fra Università e Aziende, in quanto ogni ambito può essere coperto in modo chiaro ed efficace dalla controparte più adatta. L'iniziativa CrystalSolutions è nata nel 2012 come progetto congiunto fra il Team di sviluppo di CRYSTAL ed Aethia, per rafforzare la distribuzione di CRYSTAL e offrire uno spettro più completo di servizi e know-how agli utenti. L'accordo di collaborazione è stato formalizzato come "Mandato senza rappresentanza" e ha riguardato diversi aspetti fra cui: realizzazione e gestione sito di ecommerce, gestione vendite e supporto commerciale agli utenti, soluzioni hardware e software pronte all'uso per CRYSTAL, azioni di promozione online, semplificazione dell'installazione, distribuzione in cloud (CRYCLOUD), supporto specialistico HPC per centri di calcolo, realizzazione di sistemi di visualizzazione (CRYSLOT), realizzazione di interfacce utente (CRYSTAL VLab). Per rafforzare il team di lavoro e dare maggiore priorità ad alcuni aspetti considerati strategici per il futuro di CRYSTAL, a partire dal 2017 è stato selezionato un nuovo collaboratore, coinvolto nel progetto tramite un contratto di Apprendistato in alta formazione. Dopo sei anni di collaborazione fruttuosa per tutti e un impegno reciproco che cresce nel tempo, si può considerare questa esperienza come un incontro di successo fra Università ed Azienda.



[gianpaolo.perego@aethia.com](mailto:gianpaolo.perego@aethia.com)

Note Decimo Intervento

# Sessione Poster



## Studio computazionale ab-initio della cattura di CO<sub>2</sub> in "metal-organic framework"

*B. Civalleri, F. Bonino, S. Bordiga*

La rimozione di biossido di carbonio dall'ambiente è di importanza fondamentale per ridurre la concentrazione in atmosfera. Da questo punto di vista, i materiali microporosi offrono una possibile soluzione come assorbitori di CO<sub>2</sub>. Tra questi, i composti metallo-organici reticolati (MOF, metal-organic framework [1]) hanno recentemente attirato molta attenzione per via della loro elevata porosità. Più in dettaglio, i MOF hanno una struttura formata da una parte inorganica, tipicamente un metallo o un cluster, collegata attraverso un legante organico polidentato che permette di formare un'intelaiatura ordinata e porosa. Combinando diversi componenti inorganici (metalli) e leganti organici si può quindi modulare la capacità di adsorbimento nei riguardi della CO<sub>2</sub> ed accrescerne le prestazioni in termini di separazione e immagazzinamento [2]. A questo scopo, sono state proposte diverse strategie: (i) introdurre in struttura atomi metallici esposti alla superficie che possono agire come siti privilegiati di adsorbimento e (ii) funzionalizzare il legante organico con gruppi che possono interagire con la CO<sub>2</sub> favorendone la cattura (es. amino gruppi).

Il lavoro svolto all'interno del dipartimento ha riguardato lo studio teorico-computazionale dell'adsorbimento di CO<sub>2</sub> in tre famiglie di MOF: due con siti metallici esposti e una con il legante organico funzionalizzato con amino gruppi. Per i calcoli è stato utilizzato un approccio periodico che permette di simulare il materiale nella sua interezza e metodi quanto-meccanici. Tutti i calcoli sono stati fatti con il programma CRYSTAL (<http://www.crystal.unito.it/>) [3] sviluppato dal gruppo di Chimica Teorica (TEO) del Dipartimento di Chimica. A complemento dei calcoli teorici, sono state effettuate anche delle misure sperimentali di tipo spettroscopico e calorimetrico, dal gruppo di Chimica Fisica (SURFIN). I risultati riguardano MOF con strutture cristalline a complessità crescente da medio-piccola (MOF-74) a gigante (MIL-100) in cui sono presenti differenti specie metalliche, come: Mg, Ni, Zn, Al, Sc, Cr, Fe. Per il MOF-74, i dati calcolati di entalpie di adsorbimento sono in ottimo accordo con i valori sperimentali [4]. Nel caso del MIL-100, c'è una maggiore discrepanza tra calcolo ed esperimento dovuta, molto probabilmente, alla presenza di siti difettivi [5].

Inoltre, è stato studiato un MOF a base di Zr con un legante organico funzionalizzato con amino gruppi (UiO-66-NH<sub>2</sub>). L'interazione prevista della CO<sub>2</sub> con il gruppo NH<sub>2</sub> è risultata piccola, mentre l'effetto combinato di interazione del biossido di carbonio con i gruppi OH, presenti in struttura, e con l'amino gruppo, rende bene conto dell'entalpia di adsorbimento misurata [6].

*Queste ricerche sono in parte oggetto del Dottorato di E. Albanese e J. Ethiraj e di un assegno di ricerca (M. D'Amore).*

Collaborazioni: Università di Oslo, Humboldt University Berlin; Finanziamenti: MOFCAT, PRIN2011, PRACE

[1] H.-C. Zhou, J.R. Long, O.M. Yaghi, *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 673.

[2] K. Sumida, et al., *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 724.

[3] R. Dovesi, et al., *CRYSTAL17 User's Manual 2017*, University of Torino: Torino.

[4] L. Valenzano, B. Civalleri, K. Sillar, J. Sauer, *J. Phys. Chem. C* **2011**, *115*, 21777.

[5] B. Civalleri, M. D'Amore, E. Albanese, et al. in preparation.

[6] J. Ethiraj, E. Albanese, B. Civalleri et al. *ChemSusChem*, **2014**, *7*, 3382.

([bartolomeo.civalleri@unito.it](mailto:bartolomeo.civalleri@unito.it), [francesca.bonino@unito.it](mailto:francesca.bonino@unito.it), [silvia.bordiga@unito.it](mailto:silvia.bordiga@unito.it))

## Astrochimica computazionale: come simulare la *polvere interstellare*

*L. Zamirri, S. Casassa e P. Ugliengo*

Le simulazioni computazionali basate su metodi classici e/o quantomeccanici rappresentano, oggi, un potente strumento per la ricerca in ambito astrochimico in quanto permettono di avere un dettaglio atomistico che i modelli astrofisici, gli esperimenti di laboratorio e le osservazioni dirette del *mezzo interstellare* (MIS) non sono in grado di fornire. Il MIS è costituito da molecole in fase gas e da particelle di polvere (solida) di dimensioni variabili, da pochi fino a centinaia di nanometri. Queste nano-particelle (NP), che rappresentano un'importante frazione della massa totale del MIS,<sup>1</sup> agiscono come attrattori di materiale dalla fase gas (dove la pressione è praticamente zero, inferiore a  $10^{-17}$  atm) e potrebbero rivestire un ruolo catalitico fondamentale a spiegare la grande varietà chimica caratterizzante alcune regioni del MIS, (nello specifico, le cosiddette *nubi molecolari* (NM), dove più di 200 specie sono state finora osservate tramite tecniche di spettroscopia rotazionale<sup>2</sup>).

Le osservazioni IR rivelano che una componente rilevante delle NP possiede un *nucleo* di forsterite ( $Mg_2SiO_4$ , Fo) ricoperto da un *mantello* costituito da vari strati di *ghiaccio sporco* amorfo, in cui, a parte  $H_2O$ , sono presenti altre specie, su tutte il monossido di carbonio (CO).<sup>3</sup> È bene notare come tali osservazioni IR non possano fornire dettagli strutturali fini circa la natura del cuore e/o del mantello delle NP di Fo. Osservazioni nella regione 10-50  $\mu m$  (200-1000  $cm^{-1}$ ) rivelano la presenza di due picchi larghi a circa 10 e 16-18  $\mu m$ , associati a silicati amorfi.<sup>1</sup> Inoltre, osservazioni nella regione intorno a 4.67  $\mu m$  (2143  $cm^{-1}$ ) evidenziano come la frequenza di stretching del CO solido sia leggermente *spostata verso il rosso*, ossia verso frequenze più basse, rispetto alla frequenza del CO in fase gas (4.666  $\mu m$  o 2143  $cm^{-1}$ ). L'entità di tale spostamento è di solito utilizzata per dedurre dettagli strutturali del mantello di ghiaccio.<sup>3</sup> Una conoscenza dettagliata dell'interazione CO/ $H_2O$  è fondamentale in quanto questa può influenzare diversi processi chimico-fisici nelle NM.<sup>4</sup> In questo lavoro, suddiviso in due parti, abbiamo sviluppato grazie a simulazioni classiche e quantomeccaniche, modelli strutturali del nucleo forsteritico e del mantello di ghiaccio con specifico riferimento all'interfaccia CO/ $H_2O$ . Le nostre simulazioni suggeriscono che: *i*) NP di Fo cristalline e amorphe non possono essere distinte sulla base di osservazioni IR, *ii*) diverse configurazioni CO/ $H_2O$  possono spiegare le caratteristiche spettrali osservate per il CO solido, rendendo difficile trarre conclusioni definitive circa la natura di tale interazione.

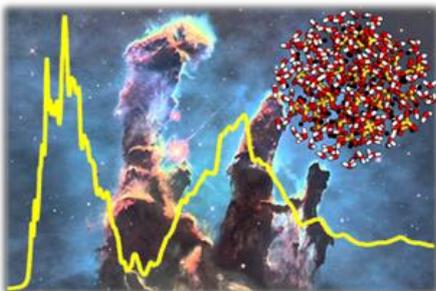
### RIFERIMENTI

1. T. Henning (2010), *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, **48**, 21–46.

2. Cologne database: <https://www.astro.uni-koeln.de/cdms>

3. A. C. A. Boogert *et al.* (2015), *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, **53**, 541–583.

4. L. Zamirri *et al.* (2018), *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **480**, 1427–1444.



In collaborazione con: Universitat de Barcelona (T. Macià, S. Bromley), Universitat Autònoma de Barcelona (A. Rimola), Université Grenoble-Alpes (C. Ceccarelli)

([lorenzo.zamirri@unito.it](mailto:lorenzo.zamirri@unito.it); [silvia.casassa@unito.it](mailto:silvia.casassa@unito.it); [piero.ugliengo@unito.it](mailto:piero.ugliengo@unito.it))

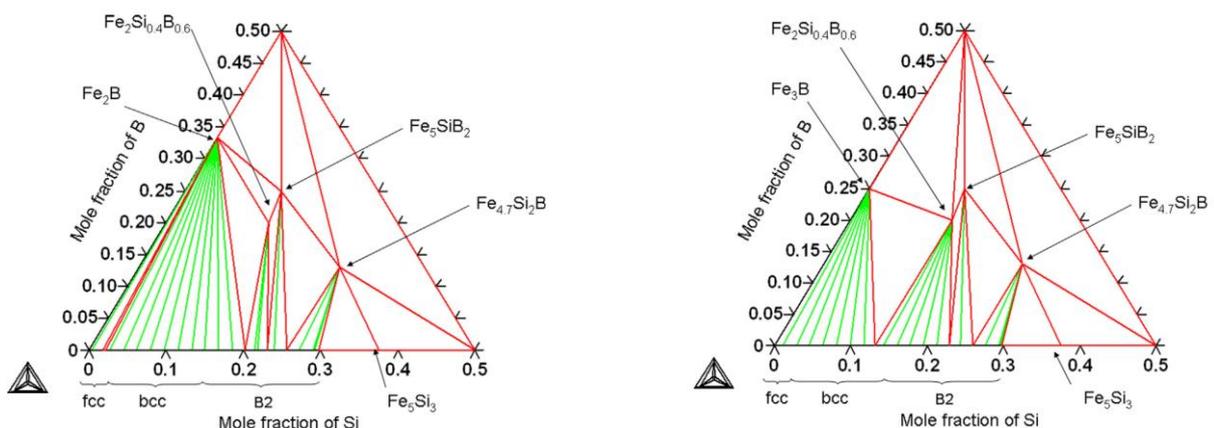
## Ottimizzazione del diagramma di stato ternario Fe-B-Si

*Marco G. Poletti, Marcello Baricco, Livio Battezzati*

Le leghe amorfe Fe-Si-B sono materiali tecnologici interessanti sia per le loro buone proprietà magnetiche che per l'eccezionale comportamento meccanico. La lega amorfa  $\text{Fe}_{78}\text{Si}_{13}\text{B}_9$  è disponibile in commercio e viene utilizzata come materiale di base nei trasformatori per la distribuzione dell'energia elettrica. Una promettente applicazione di questi materiali riguarda anche lo sfruttamento delle loro proprietà magnetoelastiche, da impiegare nei sensori e biosensori. Le proprietà di questo materiale possono essere migliorate modificando la composizione della lega mediante l'aggiunta di altri elementi. Per esempio, il FINEMET è una lega nanocristallina con buone proprietà magnetiche dolci, ottenute aggiungendo rame e niobio al sistema Fe-Si-B. Inoltre, con l'aggiunta di P e C, si possono ottenere gli acciai amorfi, vetri metallici non magnetici con una resistenza meccanica particolarmente elevata.

Le leghe amorfe sono metastabili ed è noto che i vetri metallici Fe-Si-B, analogamente a quelli binari Fe-B, cristallizzano in modi diversi a seconda del contenuto di metalloide, formando una miscela di Fe bcc con la fase metastabile  $\text{Fe}_3\text{B}$  o con la fase stabile  $\text{Fe}_2\text{B}$  [10]. La capacità della lega di formare un vetro è più alta nell'intervallo di composizione in cui si suppone che si verifichi un eutettico ternario metastabile. Le ragioni di cui sopra motivano l'interesse per gli equilibri metastabili di questo sistema ternario, sfruttando le potenzialità del metodo Calphad.

In questo lavoro, si è ottenuto un miglioramento della descrizione termodinamica del sistema Fe-Si-B ternario mediante il metodo Calphad, considerando non solo gli equilibri che coinvolgono la fase stabile  $\text{Fe}_2\text{B}$ , ma anche gli equilibri ternari metastabili in cui si osserva la fase  $\text{Fe}_3\text{B}$  (vedi figura). Inoltre, è stata introdotta la descrizione della transizione vetrosa nell'approccio Calphad come una transizione del secondo ordine, utilizzando il formalismo di Hillert-Jarl delle transizioni ferromagnetiche. L'ottimizzazione è stata fatta utilizzando i dati disponibili in letteratura riguardanti sia le fasi amorfe che quelle cristalline. I risultati migliorano quelli precedenti per la fase vetrosa, mantenendo l'accordo con i dati sperimentali relativi agli equilibri stabili.



Sezione isoterma del diagramma di stato stabile (sin) e metastabile (dx) del sistema Fe-B-Si a 1000 °C

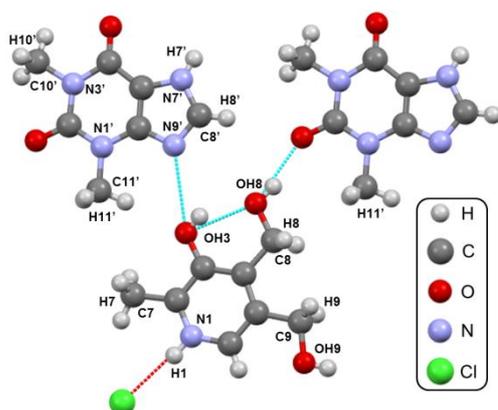
([livio.battezzati@unito.it](mailto:livio.battezzati@unito.it); [marcello.baricco@unito.it](mailto:marcello.baricco@unito.it))

Network di legami ad idrogeno nel *salt co-crystal* tra teofillina e piridossina. NMR allo stato solido e DFT

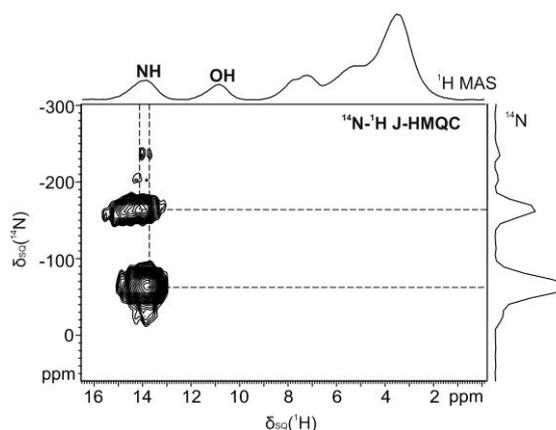
*M. R. Chierotti, C. Garino, R. Gobetto, C. Nervi*

I co-cristalli farmaceutici rappresentano una classe emergente di solidi cristallini costituiti da almeno un API (ingrediente farmaceutico attivo) e uno o più componenti appropriati (GRAS) posti all'interno dello stesso reticolo cristallino e tenuti insieme da interazioni deboli (legame ad idrogeno, legame ad alogeno,  $\pi$ -stacking). La spettroscopia di risonanza magnetica nucleare allo stato solido (SSNMR) è una tecnica versatile in grado di fornire informazioni essenziali su struttura, impaccamento e interazioni intermolecolari. Per queste sue capacità, l'SSNMR si sta dimostrando sempre più un metodo valido e complementare alla diffrazione di raggi X da cristallo singolo (SCXRD), generalmente considerata il miglior strumento per gli studi strutturali.

Qui riportiamo uno studio sperimentale e computazionale mediante SSNMR e calcoli DFT (density functional theory) di un *co-drug* tra teofillina e piridossina, un co-cristallo formato da due API generalmente amministrati nella stessa terapia. Il *co-drug* è stato inizialmente caratterizzato mediante SCXRD, spettroscopia IR e Raman e successivamente è stato condotto uno studio approfondito di SSNMR. Gli spettri SSNMR hanno fornito diverse informazioni, come il numero di molecole indipendenti nella cella unitaria ( $Z'$ ), la purezza e la cristallinità del campione, la natura neutra o ionica dell'addotto e le proprietà del legame ad idrogeno. Sono stati acquisiti diversi spettri 2D come  $^1\text{H}$  DQ MAS,  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  HETCOR,  $^{14}\text{N}$ - $^1\text{H}$  J- and D-HMQC sfruttando il miglioramento in risoluzione e sensibilità fornito dalle sequenze di impulsi a rilevazione indiretta e dalla rotazione del campione (MAS) a velocità molto elevate (70 kHz). Questi esperimenti, supportati e completati dai calcoli DFT, sono stati fondamentali per determinare accuratamente la posizione degli atomi di idrogeno e quindi per chiarire la complessa rete di legami ad idrogeno e per definire il carattere ionico del *salt co-crystal*.



**Fig. 1** Struttura cristallina del *co-drug*, con la rete di legame ad idrogeno.



**Fig. 2** Spettro  $^{14}\text{N}$ - $^1\text{H}$  J-HMQC (600 MHz; velocità di rotazione = 70 kHz).

[michele.chierotti@unito.it](mailto:michele.chierotti@unito.it); [claudio.garino@unito.it](mailto:claudio.garino@unito.it); [roberto.gobetto@unito.it](mailto:roberto.gobetto@unito.it); [carlo.nervi@unito.it](mailto:carlo.nervi@unito.it)

## CRYSLOT: un nuovo strumento per la visualizzazione delle proprietà chimiche e fisiche di solidi cristallini

*Giorgia Beata, Gianpaolo Perego, Bartolomeo Civalleri*

Gli strumenti per la visualizzazione stanno diventando sempre più importanti nell'analisi, nel supporto alla comprensione e nella presentazione dei dati scientifici [1]. In questo contributo, vogliamo quindi presentare un nuovo strumento per la visualizzazione chiamato CRYSLOT[2].



Fig. 1 Screenshot della pagina web CRYSLOT

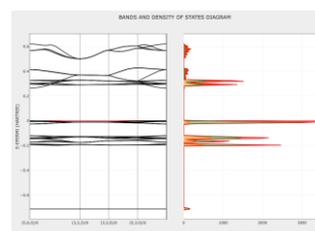


Fig. 2 Esempio di grafico combinato con struttura di bande e DOSs

CRYSLOT è stato sviluppato con le caratteristiche di un'applicazione web (<http://crysplot.crystalsolutions.eu>, Fig. 1) allo scopo di visualizzare le proprietà calcolate di sistemi periodici. La piattaforma è pensata nello specifico per rappresentare le proprietà di solidi cristallini calcolati con il codice CRYSTAL [3,4]. In particolare, la lista delle proprietà che si possono visualizzare è composta da: struttura di bande e densità degli stati (DOSs) (vedi Fig. 2); profili, mappe totali e differenza della densità di carica elettronica; mappe di potenziale elettrostatico; profili Compton e funzioni di autocorrelazione; spettri simulati infrarossi, di Raman e di riflettanza; struttura di bande e densità degli stati fononica; funzioni di analisi topologica di Bader (tra cui la densità elettronica, il Laplaciano, ...); proprietà di trasporto come la conducibilità elettronica, il coefficiente di Seebeck e la conducibilità termica degli elettroni. Oltre alla possibilità di rappresentare graficamente i grafici, CRYSLOT permette anche di modificarli e personalizzarli, in modo da raggiungere gli standard richiesti nel campo della grafica scientifica.

CRYSLOT è stato progettato con una libreria grafica avanzata e gratuita scritta in Javascript chiamata Plotly [5]. Il linguaggio di programmazione adottato è quindi stato il Javascript. Nello specifico il nostro codice analizza i file di input, controlla se i file caricati siano corretti e, se lo sono, legge i dati e li organizza in oggetti pronti per essere rappresentati mediante plotly.js. CRYSLOT è modulare e flessibile, caratteristiche che rendono semplice l'aggiunta di altri formati di dati in input.

Nel complesso, si può quindi definire CRYSLOT come uno strumento online moderno e flessibile che rende il codice CRYSTAL di più facile utilizzo per gli utenti. E' totalmente gratuito, facile da usare e accessibile da qualunque dispositivo poichè funziona come una pagina web [2].

1. M. Valle "Visualization: A Cognition Amplifier" *Int. J. Quant. Chem.* 113 (2013) 2040–2052
2. G. Beata, G. Perego, B. Civalleri, *in preparation*. Web page: <http://crysplot.crystalsolutions.eu>
3. R. Dovesi, A. Erba, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, B. Civalleri, L. Maschio, M. Rerat, S. Casassa, J. Baima, S. Salustro, B. Kirtman. "Quantum- Mechanical Condensed Matter Simulations with CRYSTAL" *WIREs Comput Mol Sci.* e1360 (2018).
4. R. Dovesi, V. R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N. M. Harrison, I. J. Bush, P. D'Arco, M. Llunell, M. Causà, Y. Noël, L. Maschio, A. Erba, M. Rerat, S. Casassa "CRYSTAL17 User's Manual" (University of Torino, Torino, 2017).
5. Plotly Technologies Inc. Collaborative data science. Montréal, QC, 2015. <https://plot.ly>

## Il sistema pseudo-ternario $\text{LiBH}_4\text{-NaBH}_4\text{-KBH}_4$ : modellazione termodinamica e studio sperimentale

*Marcello Baricco, Piero Ugliengo*

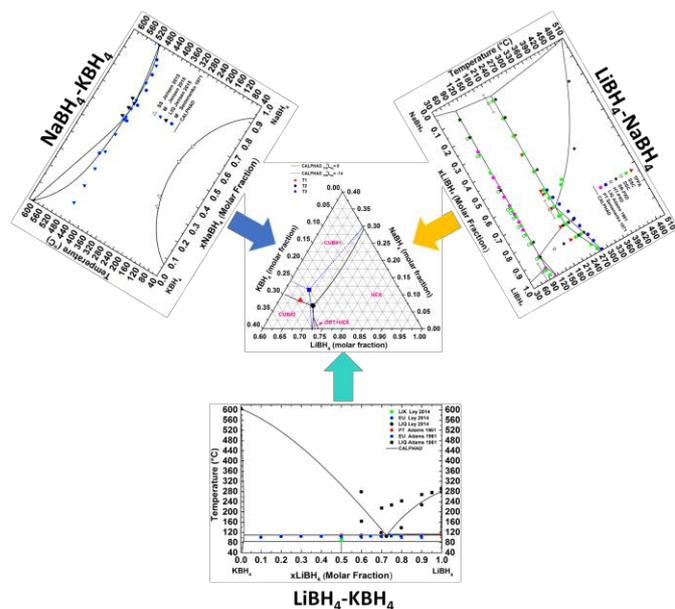
I boroidruri sono idruri complessi di interesse per lo stoccaggio dell'idrogeno e come elettroliti per batterie allo stato solido.<sup>1</sup> L'infiltrazione di miscele eutettiche di boroidridi<sup>2</sup> in nanoscaffold ha mostrato un miglioramento della cinetica e la reversibilità delle reazioni di rilascio dell'idrogeno.<sup>3</sup>

In questo lavoro è stata condotta un'indagine sul sistema ternario  $\text{LiBH}_4\text{-NaBH}_4\text{-KBH}_4$ . È stato utilizzato il metodo Calphad per valutare la termodinamica dei sistemi pseudo binari  $\text{LiBH}_4\text{-NaBH}_4$ ,  $\text{LiBH}_4\text{-KBH}_4$  e  $\text{NaBH}_4\text{-KBH}_4$ , che sono stati recentemente studiati sperimentalmente.<sup>4-6</sup> In tutti i casi, le soluzioni solide sono essere descritte mediante il modello delle soluzioni regolari, con parametri di interazione positivi o uguali a zero (soluzione ideale). Al contrario, la fase liquida è stata descritta utilizzando parametri di interazione negativa. Sono stati sintetizzati campioni con varie composizioni nel sistema pseudo-ternario mediante macinazione in mulino a palle. La caratterizzazione della loro stabilità termica è stata condotta mediante diffrazione di raggi X in situ con luce di sincrotrone, in funzione della temperatura (SR-PXD); analisi fotografica a temperatura programmata (TPPA) e calorimetria a scansione differenziale (DSC).

La temperatura del liquidus è stata determinata per diverse composizioni. La composizione eutettica ternaria è stata riportata come frazione molare  $0.65\text{LiBH}_4\text{-}0.08\text{NaBH}_4\text{-}0.27\text{KBH}_4$  con una temperatura di fusione di  $96\text{ }^\circ\text{C}$ ,<sup>7</sup> tuttavia le misure DSC e TPPA suggeriscono un diverso comportamento di fusione per questa composizione. Utilizzando i dati sperimentali raccolti, è stata condotta una valutazione termodinamica del sistema pseudo-ternario, che ha portato alla determinazione del diagramma di fase, consentendo la stima della composizione eutettica. Questa è stata confermata sperimentalmente essere pari ad una frazione molare di  $0.66\text{LiBH}_4\text{-}0.11\text{NaBH}_4\text{-}0.23\text{KBH}_4$  con una temperatura di fusione di  $102\text{ }^\circ\text{C}$ .<sup>8</sup>

### References

1. M. B. Ley, L. H. Jepsen, Y. S. Lee, Y. W. Cho, J. M. Bellosta von Colbe, M. Dornheim, M. Rokni, J. O. Jensen, M. Sloth, Y. Filinchuk, J. E. Jørgensen, F. Besenbacher and T. R. Jensen, *Mater. Today*, 2014, 17, 122–128.
2. M. Paskevicius, M. B. Ley, D. A. Sheppard, T. R. Jensen and C. E. Buckley, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2013, 15, 19774–89.
3. P. Javadian and T. R. Jensen, *Int. J. Hydrogen Energy*, 2014, 39, 9871–9876.
4. M. B. Ley, E. Roedern and T. R. Jensen, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, 16, 24194–24199.
5. S. R. H. Jensen, L. H. Jepsen, J. Skibsted and T. R. Jensen, *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119, 27919–27929.
6. Dematteis, E. M., Roedern, E., Pinatel, E. R., Corno, M., Jensen, T. R., & Baricco, M., *Rsc Advances*, 2016, 6, 65, 60101-60108.
7. Huff, G. F. US 2,935,428, 1960.
8. Dematteis, E. M., Pinatel, E. R., Corno, M., Jensen, T. R., & Baricco, M., *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2017, 19, 36, 25071-25079.



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

Il disegno sperimentale: un utile strumento a basso costo per ottimizzare prodotti e processi

*C. Barolo, S. Berto, M. Malandrino, D. Vione*

Il "Disegno Sperimentale" (traduzione letterale del termine inglese Experimental Design o Design of Experiments, DoE) è una tecnica statistica che permette di studiare e modellizzare un qualsiasi sistema o problema grazie ad un'opportuna pianificazione degli esperimenti. Grazie al DoE è possibile studiare ed ottimizzare sia i prodotti sia i processi considerando più variabili (fattori) contemporaneamente ed utilizzando il minimo numero di esperimenti significativi. In questo modo è possibile estrarre la massima informazione con il minor numero di prove sperimentali. Infatti, si identificano in primo luogo i fattori che presentano una reale influenza sulle risposte misurate, e, in secondo luogo, si creano dei modelli empirici utili per l'interpretazione dei dati sperimentali.

L'adeguata pianificazione degli esperimenti all'interno dello spazio sperimentale individuato permette di variare tutti i fattori rilevanti simultaneamente e di correlare i risultati mediante un modello matematico, che può essere usato per l'interpretazione, l'ottimizzazione e la predizione.

Nel Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino, questo approccio è impiegato sia in alcuni laboratori didattici (corso di Chemiometria e corso di Chimica Industriale relativi alle lauree magistrali in Chimica ed in Chimica Industriale rispettivamente), sia in ambito di ricerche sviluppate anche in collaborazione con aziende. Si spazia dall'ottimizzazione delle formulazioni e dei metodi di analisi, alle sintesi di prodotti chimici ed alla preparazione di dispositivi fotovoltaici ibridi. [1-6] Nel poster saranno evidenziati i punti di forza e le problematiche relative a questo approccio, grazie all'utilizzo di semplici esempi pratici.

Queste ricerche sono derivate in parte dalla tesi di dottorato di S. Galliano ed in parte dal dott. Luca Carena e dalla dott.ssa Eleonora Conca nell'ambito di un progetto finanziato dalla Fondazione CRT.

Collaborazioni: Gruppo GAMELAB Politecnico di Torino, Università del Piemonte Orientale, BIOOPS srl, Chiorino Spa, ITT S.R.L., ARPA Piemonte

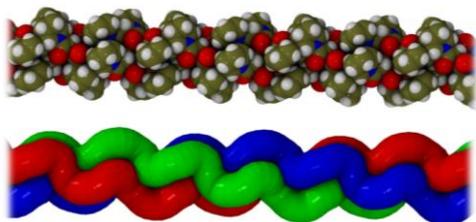
- [1] F. Bella, et al., PCCP, 15 (2013) 3706-3711.
- [2] V. Gianotti, et al., ChemSusChem, 7 (2014) 3039-3052.
- [3] N. Barbero, et al., Org. Lett., 17 (2015) 3306-3309.
- [4] E. Conterposito, et al. ChemSusChem 9 (2016) 1279-1289.
- [5] S. Galliano, et al. Solar Energy, 163 (2018) 251-255.
- [6] S. Berto, et al., Electrochimica Acta, 284 (2018) 279-286.

[claudia.barolo@unito.it](mailto:claudia.barolo@unito.it); [silvia.berto@unito.it](mailto:silvia.berto@unito.it); [mery.malandrino@unito.it](mailto:mery.malandrino@unito.it); [davide.vione@unito.it](mailto:davide.vione@unito.it)

## Quali Sono le Forze che Sostengono la Struttura del Collagene? Indizi dalle Simulazioni Ab Initio

*Michele Cutini and Piero Ugliengo*

Il collagene è una delle proteine più abbondanti nei mammiferi. È l'elemento costitutivo di complesse strutture gerarchiche come le ossa e i tendini [1]. La sua peculiarità strutturale è il motivo geometrico in cui tre fili polipeptidici paralleli si avvolgono l'uno sull'altro per formare una tripla elica (vedi Figura 1) [1]. La struttura primaria del collagene è principalmente costituita da una sequenza ripetuta di triplette [2]. In ogni tripletta, la glicina (Gly) occupa sempre la prima posizione, mentre la prolina (Pro) e i suoi derivati, ad es. idrossile-prolina (Hyp), sono gli amminoacidi più comuni rispettivamente nella seconda e nella terza posizione. All'interno di tutti i collageni, la Gly è l'amminoacido che appare più frequentemente (33%). Inoltre la Pro e la Hyp insieme rappresentano il ~22% di tutti i residui [3]. La Hyp è un amminoacido non naturale. Il processo di idrossilazione dell'anello della Pro si verifica ad opera di un enzima dopo la formazione della tripla elica del collagene nelle cellule. L'idrossilazione ha il ruolo rilevante di aumentare la stabilità del collagene impedendo la sua rapida denaturazione alla



**Figura 1.** Il Collagene.

temperatura corporea. Nell'ultimo decennio, sono stati condotti diversi studi sperimentali per spiegare le ragioni di questo effetto di stabilizzazione. Nonostante la grande mole di lavoro svolto, lo scenario non è ancora chiaro.

Le simulazioni molecolari a livello di DFT combinano risoluzione atomica e precisione chimica e possono essere uno strumento utile per lo studio dei sistemi biologici. Il suo limite principale è la dimensione dei sistemi investigabili, che è molto limitata, quindi è un metodo usato raramente nello studio delle proteine. Grazie a modelli polimerici di collagene altamente simmetrici, abbiamo ridotto il costo computazionale dei nostri calcoli, riuscendo così a calcolare il processo di avvolgimento di una tripla elica di collagene. Inoltre, ci siamo concentrati sull'effetto dell'idrossilazione della Pro confrontando l'energia di avvolgimento tra collageni idrossilati e non idrossilati. Le molecole d'acqua, che hanno un ruolo molto delicato nel processo di avvolgimento, devono essere incluse esplicitamente nelle simulazioni per una rappresentazione affidabile di questo fenomeno naturale.

[1] P. Fratzl, (Springer Berlin / Heidelberg, 2008).

[2] J. Bella, *J. Biochem.* (2016) 1001–25.

[3] J. A. M. Ramshaw, N. K. Shah, B. Brodsky, *J. Struct. Biol.* **122**, (1998) 86–91.

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

Nuovi materiali termoelettrici dai calcoli ab-initio.

*A. Dasmahapatra, S. Casassa, A. Castellerò, M. Baricco, L. Maschio*

Nel Dipartimento di Chimica le attività di ricerca sulla tecnologia termoelettrica sono sviluppate con un approccio multidisciplinare che va dalla modellizzazione delle proprietà di trasporto dei materiali, allo sviluppo di processi metallurgici scalabili a livello industriale, all'integrazione dei materiali in dispositivi termoelettrici.

Mediante metodi ab-initio è possibile calcolare in modo accurato le proprietà dei materiali termoelettrici. Questo approccio permette, da un lato, di modellizzare e ottimizzare le proprietà di materiali già esistenti mediante drogaggio o sostituzione isoelettronica di atomi, e dall'altro, di prevedere le proprietà di nuovi materiali che non sono mai stati sintetizzati.

Il software Crystal ([www.crystal.unito.it](http://www.crystal.unito.it)) permette di simulare le caratteristiche chimico-fisiche dei materiali cristallini a livello atomistico tramite la Teoria del Funzionale della Densità (DFT). Le proprietà di trasporto, di cui la conducibilità elettrica è un esempio, sono alla base del fenomeno termoelettrico, e possono essere calcolate con grande accuratezza dalla struttura di bande elettronica di un materiale.

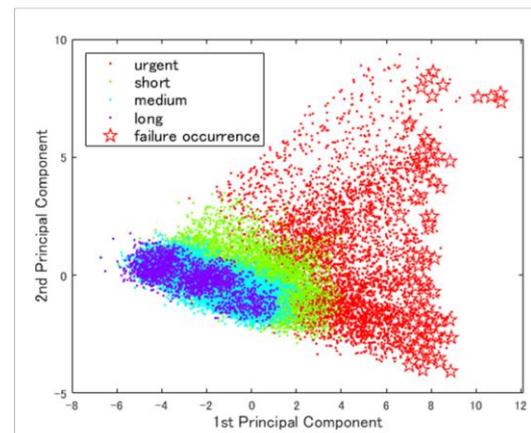
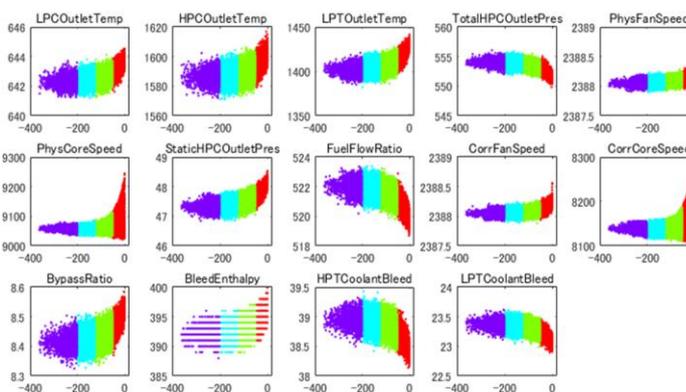
Tra le diverse classi di materiali che mostrano interessanti potenzialità dal punto di vista termoelettrico, l'attività di simulazione all'interno del nostro dipartimento si è recentemente concentrata sulle leghe di tipo Heusler ed Half-Heusler. Questi composti sono particolarmente interessanti sia da un punto di vista applicativo che da uno più fondamentale: anche se alcune leghe Half-Heusler sono conosciute e studiate da tempo, manca ancora una comprensione profonda dei meccanismi chimico-fisici alla base delle loro proprietà termoelettriche, il che permetterebbe di indirizzare e guidare la ricerca di nuovi composti con caratteristiche innovative.

([atreya.dasmahapatra@unito.it](mailto:atreya.dasmahapatra@unito.it); [silvia.casassa@unito.it](mailto:silvia.casassa@unito.it); [alberto.castellerò@unito.it](mailto:alberto.castellerò@unito.it);  
[marcello.baricco@unito.it](mailto:marcello.baricco@unito.it); [lorenzo.maschio@unito.it](mailto:lorenzo.maschio@unito.it))

## Manutenzione predittiva e chemiometria: strumenti utili per l'ambito industriale

*E. Alladio, M. Baricco, M. Vincenti*

La manutenzione predittiva è uno strumento che riveste un ruolo sempre più importante non solo nell'industria di produzione, ma anche nella vita quotidiana di tutti coloro che utilizzano macchine ed impianti. Più nel dettaglio, la manutenzione predittiva è uno strumento per pianificare una manutenzione preventiva degli impianti industriali. Questa che viene eseguita al verificarsi di eventi derivanti dal monitoraggio di parametri misurati ed estrapolati utilizzando appropriati modelli matematico-statistici, con lo scopo di individuare il tempo residuo prima del manifestarsi di un guasto. Uno dei presupposti necessari per applicare questa approccio analitico/operativo è la possibilità di rilevare e immagazzinare dati raccolti tramite i sensori di una macchina in esame, con l'obiettivo di avere informazioni specifiche dell'impianto. La costruzione di un database storico consente, quindi, di applicare tecniche e strumenti chemiometrici, di analisi dei dati multivariati o, più generalmente, di Machine Learning, allo scopo di implementare programmi e software applicativi di manutenzione specifici. Uno degli approcci più utilizzati in questo ambito è l'Analisi delle Componenti Principali (un esempio è riportato nella figura sottostante), la quale consente di rappresentare in modo semplice e chiaro eventuali tendenze ed andamenti anomali delle condizioni di lavoro degli strumenti in esame.



Riuscire ad applicare con profitto tecniche di analisi manutentiva predittiva comporta molteplici vantaggi, tra cui:

- identificare tempestivamente anomalie nei macchinari per evitare ripercussioni di carattere economico, ambientale e in un'ottica di sicurezza;
- permettere la riduzione di costi;
- assicurare la possibilità di estendere e massimizzare la vita di impianti e strumentazioni.

Un sistema di manutenzione predittiva consente così non solo di anticipare il verificarsi di un guasto, ma anche di indirizzare efficacemente le risorse, eliminando le attività di manutenzione non necessarie, migliorando la complessiva efficienza produttiva.

([eugenio.alladio@unito.it](mailto:eugenio.alladio@unito.it); [marcello.baricco@unito.it](mailto:marcello.baricco@unito.it); [marco.vincenti@unito.it](mailto:marco.vincenti@unito.it))





[chimica.eventi@unito.it](mailto:chimica.eventi@unito.it) | 011 670 7592/8352

Dipartimento di Chimica | Via P. Giuria, 7 - Torino



CHIMICA  
**PASSIONE  
PERIODICA**

**MAGGIO > DICEMBRE 2018**  
**AULA AVOGADRO**  
**VIA P. GIURIA, 7**  
**DIPARTIMENTO DI CHIMICA**  
**UNIVERSITA' DI TORINO**

**GLI EVENTI SONO GRATUITI**  
**PER PARTECIPARE ISCRIVITI SU**  
**[WWW.CHIMICA-RICERCA.UNITO.IT](http://WWW.CHIMICA-RICERCA.UNITO.IT)**  
**O SCANSIONA IL QR-CODE**

## **6 GIOVEDI' TEMATICI SULLA (NOSTRA) CHIMICA**

### **3 MAG: SOCIETA'**

**DIDATTICA, BENI CULTURALI, CHIMICA FORENSE**  
DAI LIBRI ALL'INDAGINE SUL CAMPO, IL CONTRIBUTO  
DELLA CHIMICA ALLE SFIDE DELLA SOCIETA'

### **7 GIU: BENESSERE**

**SICUREZZA ALIMENTARE E SALUTE**  
TECNOLOGIE E STRUMENTI INNOVATIVI PER LA SALUTE  
E LA SICUREZZA ALIMENTARE

### **5 LUG: AMBIENTE**

**CHIMICA VERDE, ECONOMIA CIRCOLARE**  
UN USO EFFICIENTE DELLE RISORSE PER MIGLIORARE  
IL NOSTRO IMPATTO SUL PIANETA

### **4 OTT: ENERGIA**

**RINNOVABILE, PULITA, EFFICIENTE**  
NUOVI APPROCCI PER LA PRODUZIONE,  
LA TRASFORMAZIONE E LO STOCCAGGIO DI ENERGIA

### **8 NOV: BIG DATA**

**MODELLI PREDITTIVI, SIMULAZIONE, ANALISI**  
L'USO DEI BIG DATA PER L'ANALISI CHIMICA  
E LA SIMULAZIONE NUMERICA DI MOLECOLE E MATERIALI

### **6 DIC: MATERIALI**

**INDUSTRIA 4.0, SMART MATERIAL,  
ADDITIVE MANUFACTURING**  
MATERIALI E TECNOLOGIE INNOVATIVE PER LE SFIDE  
PRODUTTIVE DELL'INDUSTRIA ITALIANA

