

Andrea Maranzana, nato ad Alessandria il 4/1/1973, ha conseguito la laurea in Chimica il 9/12/1997 presso l'Università degli Studi di Torino, sede di Alessandria, con voto 110/110, lode e menzione. Titolo della Tesi: "Studio teorico delle reazioni di  $O_2$  ( $^1\Delta_g$ ) con alcheni".

Il 28/1/2003 ha conseguito il titolo di dottore di ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Torino. Titolo della tesi: "Reazioni di ossidazione di molecole organiche insature da parte di  $^1\Delta_g O_2$ ".

Nel 2003 ha collaborato come esperto esterno pagato su fondi di ricerca, presso il dipartimento di Chimica Generale ed Organica Applicata, sotto la supervisione del prof. Glauco Tonachini.

E' stato titolare di un assegno di ricerca biennale (1/1/2004 – 31/12/2005), presso il dipartimento di Chimica Generale ed Organica Applicata, Università di Torino. Titolo della ricerca: "Studio teorico della ossidazione di sistemi insaturi".

Ha ottenuto una borsa di studio Post-doc (14/2/2006 – 15/2/2008), presso il Department of Atmospheric Oceanic and Space Sciences, University of Michigan, Stati Uniti. Supervisione: prof. John R. Barker. In questo periodo, oltre alle cinetiche di ossidazione troposferica dell'acetil radicale e di alchini, Andrea Maranzana si è anche dedicato allo sviluppo del software Multiwell (<http://aoss-research.engin.umich.edu/multiwell/>).

E' stato titolare di un assegno di ricerca (1/3/2008 – 15/12/2008), presso il dipartimento di Chimica Generale e Chimica Organica dell'Università di Torino, in collaborazione con il consorzio interuniversitario nazionale "la chimica per l'ambiente" (INCA). Titolo della ricerca: "Studio teorico dei meccanismi di reazione per processi organici di interesse nel campo della chimica per l'ambiente".

Dal 15/12/2008 è ricercatore universitario presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino.

#### *Attività didattica:*

Laboratorio di Chimica Organica III (laurea triennale in chimica): sintesi organiche e caratterizzazioni attraverso NMR, gas cromatografia e spettrometria di massa.

Laboratorio di Chimica Organica Ambientale (laurea magistrale in chimica dell'ambiente): simulazione quantomeccaniche di reazioni e processi ossidativi che avvengono nella troposfera.

Chimica Organica Ambientale: ciclo di lezioni di introduzione alla *Green Chemistry*.

## *Attività scientifica*

Le linee di ricerca, orientate verso le tematiche ambientali, riguardano reazioni che avvengono in troposfera o in processi combustivi. Sono mirate a definire modelli per la funzionalizzazione della fuliggine, di grande interesse ambientale in quanto legato ad una maggiore comprensione del ruolo del particolato atmosferico. Su questi modelli vengono studiati i meccanismi di degradazione ossidativa di idrocarburi policiclici aromatici (PAH) e le trasformazioni del particolato carbonioso che possono dare luogo alla formazioni di derivati cancerogeni e mutageni. Si investiga anche la formazione dei PAH e della fuliggine con l'obiettivo di comprendere meccanismi di formazione combustiva (o pirolitica) di un primo anello insaturo e la sua crescita. Questo è un passo molto importante sia per i processi di formazione dei PAH che della fuliggine. La reazione avviene tra molecole presenti in frazione molare importante nelle fiamme di etino, benzene, toluene o altri aromatici, o benzina, come il propargil radicale ed il butadiino. Questi sistemi possono delineare in linea di principio dei cammini che portano a cicli a 4, 5, 6, o 7 atomi di carbonio. Alchini e poliini non sono solo coinvolti nella formazione degli IPA, ma anche in processi di ossidazioni atmosferiche che sono anch'essi oggetto di studio.

Un'ulteriore evoluzione consiste nello studio dei meccanismi di aggregazione dei PAH gassosi per formare un primo nucleo solido (nucleazione) attraverso processi di condensazione o coagulazione

Un'altra linea di ricerca si incentra sui meccanismi di reazione di ossidazione da parte di  $^1\text{O}_2$  con sistemi insaturi.  $^1\text{O}_2$  viene generato spontaneamente nella troposfera per fotolisi dell'ozono o durante reazioni di ossidazione e combustione di idrocarburi (autoossidazione). Esso mostra una ampia capacità di reagire con molecole organiche insature: tra i vari tipi di reazioni che coinvolgono  $^1\text{O}_2$  sono possibili le cicloaddizioni  $[\pi 2 + \pi 2]$  che avvengono su un doppio legame C=C e che producono un diossetano, o le reazioni  $[\pi 4 + \pi 2]$  che generano un endoperossido. Qualora sia presente un idrogeno allilico si apre un altro canale che prevede la formazione di un idroperossido insaturo: questa è chiamata reazione ene (o di Schenck). Lo studio si estende anche ad alcheni superiori come i polimetil sostituiti e composti carbonilici  $\alpha, \beta$ -insaturi.

Infine un'altra linea di ricerca riguarda la Green Chemistry: l'oggetto di studio sono i meccanismi di reazione di carbonati disostituiti utilizzati in reazioni di metilazione e ciclizzazione

### *Metodologie di indagine*

Le strutture elettroniche di sistemi molecolari sono investigate con svariati metodi di calcolo come CAS-MCSCF e CAS-PT2, MP2/MP4, CCSD(T) e la teoria DFT (Teoria del Funzionale della Densità) in connessione con moderni funzionali.

*Utilizzo del software:* Gaussian, Molpro, Molcas, Gamess con programmazione in Fortran77 e Fortran90.

Andrea Maranzana partecipa allo sviluppo del programma Multiwell (<http://aoss-research.engin.umich.edu/multiwell/>) per il calcolo di cinetiche di sistemi non all'equilibrio termico, vibrazionalmente eccitati (RRKM e Master Equation).