

## Dalla Chimica Inorganica ai Sistemi Biologici: un Viaggio attraverso la Chimica Computazionale

Valentina Migliorati

La chimica computazionale costituisce un elemento imprescindibile della scienza moderna, offrendo una finestra atomistica su processi e materiali. Grazie all'uso di un'ampia varietà di metodi di calcolo, essenzialmente basati sulle leggi della meccanica classica o della meccanica quantistica, è infatti possibile studiare in dettaglio le proprietà strutturali, energetiche, spettroscopiche e dinamiche dei sistemi. Quando viene usata in combinazione con dati sperimentali, questa branca della chimica rende accessibile un livello di comprensione dei fenomeni microscopici altrimenti non raggiungibile. Per questi motivi, oggi la chimica computazionale è ampiamente utilizzata in tutti gli ambiti scientifici, trovando applicazione anche in settori emergenti e di grande attualità come l'energia sostenibile, la progettazione di farmaci, i materiali avanzati e la catalisi ambientale.

In questo seminario vi mostrerò come, grazie alla chimica computazionale, sia possibile studiare in dettaglio una vasta gamma di fenomeni. Ripercorrendo la mia attività di ricerca degli ultimi tre anni, verranno descritti i risultati ottenuti nello studio di sistemi disordinati, con particolare attenzione ad aspetti ancora poco compresi come la chimica di coordinazione dello ione  $Pb^{2+}$  in acqua o la *driving force* che porta alla formazione dei solventi eutettici profondi. Tali solventi sono attualmente di grande interesse nell'ambito della chimica verde, poiché combinando sostenibilità, biodegradabilità e versatilità offrono un'alternativa ecocompatibile ai solventi organici tradizionali.

Un'altra tematica di grande attualità affrontata nel seminario, che è al centro del dibattito pubblico e scientifico, sarà l'inquinamento delle acque da sostanze perfluoroalchiliche (PFAS) e il ruolo delle nanoplastiche polimeriche nel co-trasporto di questi contaminanti. Infine vi presenterò uno studio recente di Dinamica Molecolare su una mutazione delle proteine che costituiscono il nucleosoma, alla base dello sviluppo di diversi tipi di cancro.