

CHIMICA AMBIENTALE e CHEMIOMETRIA
F58 specialistica (5 crediti: 3 - CHIM12 + 2 - CHIM01)

Prof. Paola GRAMATICA FORNI

Reattività ambientale di inquinanti organici: principali reazioni: ossidazioni, riduzioni, idrolisi, fotochimica.

- **Reattività in sistemi acquosi:** idrolisi, ossido-riduzioni.
- **Reattività nel comparto suolo:** reazioni acido-base e di scambio ionico; reazioni di ossidazione nel *top-soil* e di riduzione nei sedimenti.
- **Reattività atmosferica:** Reazioni di ossidazione di composti organici: reazioni con ossigeno, con radicali OH e NO₃, con ozono. Reazioni di nitrificazione: nitrofenoli, Perossi Acetil Nitrato (PAN) Reazioni fotochimiche. Reazioni coinvolte nello sviluppo dello smog fotochimico. Reazioni responsabili della deplezione dell'ozono stratosferico. Particolato atmosferico (PM10, PM2.5) e problematiche connesse.

Chemimetria

- Analisi esplorativa dei dati: PCA, Cluster Analysis, analisi di similarità (reti neurali:mappe di Kohonen)
- Validazione dei modelli. Metodi di selezione delle variabili.
- Modelli di regressione: MLR, PLS
- Modelli di classificazione: CART, Analisi discriminante.
- Criteri multipli decisionali.

Modelli predittivi a base strutturale

- Evoluzione delle metodologie QSAR/QSPR (relazioni quantitative struttura-attività o proprietà). Descrittori molecolari sperimentali e teorici.
- Applicazioni di metodologie chemiometriche per la previsione QSAR di proprietà chimico-fisiche e di attività biologiche o reattività chimiche di composti organici di rilevanza ambientale: esercitazioni al computer.

Testi consigliati:

- S. E. Manahan "Chimica dell'Ambiente" Ed. It. Piccin, 2000.

- B. Rindone, "Introduzione alla chimica ambientale"-Città Studi Ed., 1996

- R. Todeschini "Introduzione alla Chemimetria" Ed. Edises, 1998.

Testi di consultazione: - R.P. Schwarzenbach, P.M. Gschwend and D.M. Imboden, "Environmental Organic Chemistry" - John Wiley & Sons Ed., 1993.

- R.A. Larson and E.J. Weber, "Reaction Mechanisms in Environmental Organic Chemistry" Lewis Pub., 1994.

- B.J. Alloway and D.C. Ayres "Chemical Principles of Environmental Pollution" Blackie Acad. 1997.

