

## **Breve curriculum di Glauco Tonachini**

Laureatomi presso l'Università di Torino con 110 e lode, trascorsi due periodi di formazione fuori sede per un totale di quattro anni, lavorando prima due anni con i professori Fernando Bernardi, Michael A. Robb e H. Bernhard Schlegel presso l'Università di Bologna, poi trascorrendo un biennio come *post-doctoral fellow (research associate)* presso il professor H. Bernhard Schlegel, alla Wayne State University di Detroit (USA). Prima ricercatore, poi professore associato, dal 2000 sono in servizio come professore di prima fascia presso la Facoltà di Scienze, Università di Torino, Dipartimento di Chimica.

L'attività di ricerca si è svolta nel campo della **Chimica Organica**. Abbiamo sviluppato diversi **studi teorici quantomeccanici di reazioni** chimiche, come contributo alla **definizione dei loro meccanismi** (definizione della struttura geometrica e elettronica di sistemi molecolari, e dei dettagli meccanicistici e della termochimica di reazioni organiche o inorganiche).

Lo studio è stato ed è condotto in genere con i metodi CAS-MCSCF (*Complete Active Space Multi-Configuration Self Consistent Field*) e/o CAS-PT2 (calcolo perturbativo con una funzione d'onda di riferimento multiconfigurazionale), DFT (*Density Functional Theory*), e Coupled Cluster.

In anni recenti abbiamo studiato: (a) reazioni organiche di **migrazione**, (b) reazioni **pericicliche** (ruolo dei cammini concertati e non, ruolo di intermedi diradicalici o anfoionici), (c) reazioni di O<sub>2</sub> con idrocarburi (per O<sub>2</sub> singoletto, **cicloaddizione**, con formazione di diossetani, e reazioni **ene**; per O<sub>2</sub> tripletto, **decomposizioni ossidative** di tipo radicalico di specie insature e sature). In particolare ultimamente abbiamo affrontato anche problemi meccanicistici relativi a reazioni di **rilevanza ambientale**, inerenti ai **processi combustivi** e di **ossidazione troposferica** di idrocarburi: (d) nitratura in troposfera e durante combustione di IPA (idrocarburi policiclici aromatici); (e) **nascita di nanoparticelle carboniose**, struttura e **funzionalizzazione delle medesime** come componenti della fuliggine, in particolare interazione di IPA e di fuliggine con ozono.

- PI (principal investigator) nel progetto europeo EUROTRAC-2.
- Partecipante (associato) ai progetti europei ACCENT e in seguito ACCENT PLUS.
- Web site: <http://www.thecream.unito.it>

### ***Brief curriculum vitae of Glauco Tonachini.***

I spent two years of study and research at the Bologna University, working with professors Fernando Bernardi, Michael A. Robb and H. Bernhard Schlegel. Then two years as post-doctoral fellow working with professor H. Bernhard Schlegel, at the Wayne State University (Detroit, USA). I have been researcher, then associate professor, and now, as of the year 2000, full professor at the Department of Chemistry, Università di Torino.

My research activity has mainly been in the field of Organic Chemistry. I have carried out theoretical non-empirical studies on some chemical reactions, aimed to describe their mechanism (definition of the geometric and electronic structures of molecular systems, of the mechanistic details and thermo-chemistry of organic or inorganic reactions).

Such theoretical studies are carried out mainly by the following methods: CAS-MCSCF (*complete active space multi-configuration self consistent field*) and/or CAS-PT2 (perturbative computation with multiconfigurational reference wavefunction), DFT (Density Functional Theory); Coupled Cluster.

Research lines active in recent years are about: (a) organic rearrangements; (b) pericyclic reactions (role of concerted pathways and diradical/zwitterionic intermediates); (c) reactions of O<sub>2</sub> and hydrocarbons (singlet O<sub>2</sub>: cycloadditions with dioxetane formation, and ene reactions; triplet O<sub>2</sub>: oxidative radical decompositions of unsaturated and saturated species). In particular, we have recently focused on hydrocarbon combustion and atmospheric oxidation, which are themes of environmental interest. Namely, on (d) tropospheric PAH nitration, (e) soot structure and functionalization, (f) ozone interaction with PAHs and soot.

- PI (principal investigator) of the european project EUROTRAC-2.
- Participating (as associate) in the european projects ACCENT and ACCENT PLUS.

Web site: <http://www.thecream.unito.it>

## Una selezione di lavori recenti.

## A selection of recent papers.

1. A Theoretical Investigation of Soot Nanoparticle Inception via Coagulation. Energetic, Structural, and Electronic Features. A. Giordana, A. Maranzana, G. Tonachini  
*J. Phys. Chem. C* **2011**, *115*, 1732–1739. DOI: 10.1021/jp109853f
2. Border Reactivity towards Ozone of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Soot Platelets. A Theoretical Study. A. Giordana, A. Maranzana, G. Ghigo, M. Causà, G. Tonachini  
*J. Phys. Chem. A* **2011**, *115*, 470–481. DOI: 10.1021/jp1067044
3. Carbonaceous Molecular Nanoparticle Inception from Radical Addition or Coagulation Involving PAH Systems. A Theoretical Study. A. Giordana, A. Maranzana, G. Tonachini  
*J. Phys. Chem. C* **2011**, *115*, 17237–17251. DOI: 10.1021/jp2010698
4. The Mechanism of the Acid Catalyzed Benzidine Rearrangement of Hydrazobenzene. A Theoretical Study. G. Ghigo, S. Osella, A. Maranzana, G. Tonachini  
*Eur. J. Org. Chem.* **2011**, *12*, 2326–2333. DOI: 10.1002/ejoc.201001636
5. Synthesis of 5-Membered cyclic ethers by reaction of 1,4-diols with dimethyl carbonate  
P. Tundo, F. Aricò, A. Maranzana, G. Tonachini  
*ChemSusChem* **2012**, *5*, 1578–1586. DOI: 10.1002/cssc.201100755.
6. A change from stepwise to concerted mechanism in the acid-catalysed benzidine rearrangement: a theoretical study. G. Ghigo, A. Maranzana, G. Tonachini  
*Tetrahedron* **2012**, *68*, 2161–2165. DOI: 10.1016/j.tet.2012.01.014
7. Growth of polyaromatic molecules via ion-molecule reactions: an experimental and theoretical mechanistic study of the biphenyl cation + benzene reaction.  
D. Ascenzi, J. Aysina, P. Tosi, A. Maranzana, G. Tonachini  
*J. Chem. Phys.* **2013**, *138*, 204310. DOI: 10.1063/1.4807486
8. First carbon ring closures started by the combustive radical addition of propargyl to butadiyne. A theoretical study. A. Indarto, A. Maranzana, G. Ghigo, G. Tonachini  
*Combustion & Flame* **2013**, *160*, 2333–2342. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.05.024>
9. The Memory Effect in Rearrangements: Structural and Dynamic Study.  
Giovanni Ghigo, Andrea Maranzana, Glauco Tonachini  
*J. Org. Chem.* **2013**, *78*, 9041–9050. DOI: [dx.doi.org/10.1021/jo401188e](http://dx.doi.org/10.1021/jo401188e)
10. DFT study of the interaction of vinyl radical, ethyne, and ethene with benzene aimed to define an affordable computational level to investigate large van der Waals complexes.  
A. Maranzana, A. Indarto, A. Giordana, G. Tonachini, V. Barone, M. Causà, M. Pavone  
*J. Chem. Phys.* **2013**, *138*, 244306, 1–16. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4846295>
11. First ring formation by radical addition of propargyl to but-1-yne-3-ene in combustion. Theoretical Study of the C<sub>7</sub>H<sub>7</sub> Radical System.  
D. Trogolo, A. Maranzana, G. Ghigo, G. Tonachini  
*J. Phys. Chem. A* – DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/jp4082905> – **in stampa**
12. Towards the control of product selectivity in the CO<sub>2</sub> oxidation of CH<sub>4</sub> in a dielectric barrier discharge.  
L. M. Martini, G. Guella, A. Maranzana, G. Tonachini, and P. Tosi  
*Chemical Physics Letters* – **in stampa**