

2ND INTERNATIONAL CONFERENCE ON HYDROGEN ATOM TRANSFER (ICHAT 2017)

Massimo Bietti

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche

Università di Roma "Tor Vergata"

bietti@uniroma2.it

Resoconto della 2nd International Conference on Hydrogen Atom Transfer - iCHAT 2017, che si è svolta a Monteporzio Catone (Roma) dal 2 al 6 luglio 2017 e incentrata sui diversi aspetti delle reazioni di trasferimento di atomo di idrogeno (HAT).

La seconda edizione dell'International Conference on Hydrogen Atom Transfer - iCHAT 2017 (<http://ichat2017.uniroma2.it>) si è svolta a Monteporzio Catone (Roma) dal 2 al 6 luglio 2017, presso la sede di Villa Mondragone, villa cardinalizia del XVI secolo di proprietà dell'Università di Roma "Tor Vergata" (www.villamondragone.it). Le sessioni scientifiche sono state tenute nella prestigiosa Sala degli Svizzeri, cornice nel 1582 di un importante evento storico, la Riforma del Calendario Giuliano voluta da Papa Gregorio XIII. iCHAT 2017 segue la prima edizione della Conferenza (iCHAT 2014), svoltasi presso la stessa sede nel giugno 2014. La terza edizione è in programma per l'estate del 2020 (iCHAT 2020).



Villa Mondragone. Veduta del Portico del Vasanzio

iCHAT 2017 è stata organizzata congiuntamente dalle Università di Roma "Tor Vergata" e "La Sapienza" e dalla University of British Columbia (Canada), con un Comitato Organizzatore composto da Massimo Bietti, Michela Salamone e Teo Martin (Università "Tor Vergata"), Osvaldo Lanzalunga e Andrea Lapi (Università "La Sapienza") e Gino A. DiLabio (University of British Columbia).

La Conferenza si è svolta sotto il patrocinio della Società Chimica Italiana, con il contributo dell'Università "Tor Vergata" e la sponsorizzazione di aziende quali Hellma Italia, TCI Europe e

Zentek Srl e di gruppi editoriali e riviste scientifiche, quali Elsevier, *Nature Chemistry* e *Nature Communications*.



I componenti del comitato organizzatore di iCHAT 2017 durante un evento sociale

Le reazioni di trasferimento di atomo di idrogeno (HAT) intervengono in un'ampia varietà di processi chimici e biologici di grande importanza. Esempi rilevanti includono il danno ossidativo a biomolecole e polimeri, il meccanismo d'azione di antiossidanti naturali e sintetici, il meccanismo d'azione di diversi enzimi e di loro modelli biomimetici e la degradazione di composti organici volatili nell'atmosfera.



Foto di gruppo iCHAT 2017

In questo contesto, un altro aspetto di grande importanza riguarda la funzionalizzazione selettiva di legami C-H alifatici, che rappresenta attualmente una delle maggiori sfide per la moderna chimica organica sintetica. Lo scopo principale della Conferenza è stato quindi quello di riunire scienziati e studiosi provenienti da diversi settori scientifici disciplinari con competenze nel campo dei processi HAT, capaci di offrire contributi e prospettive diverse su questa importante tematica in modo tale da promuovere, in un contesto altamente multidisciplinare, contatti e collaborazioni a livello internazionale.

iCHAT 2017 ha visto la partecipazione di 100 conferenzieri (tra i quali 33 giovani ricercatori) provenienti da 19 nazioni: Italia, Stati Uniti d'America, Spagna, Germania, Cina, Regno Unito, Corea del Sud, Australia, Canada, Austria, Francia, Israele, Giappone, Svezia, Svizzera, Croazia, Grecia, Svizzera e Singapore, con 64 partecipanti provenienti da Paesi europei (28 dall'Italia), 20 dal Nord America, 13 dall'Asia e 3 dall'Oceania.

La Conferenza è stata articolata in 14 sessioni distribuite su 5 giorni, con 32 presentazioni orali ad invito, 20 presentazioni orali selezionate tra le richieste ricevute ed una sessione poster con 29 contributi.

Titoli e autori delle presentazioni orali ad invito, riportati di seguito, forniscono una panoramica sulla varietà degli argomenti trattati nel corso della Conferenza evidenziando nello stesso tempo l'importanza della tematica e l'elevato livello scientifico degli scienziati coinvolti, trattandosi di alcuni tra i maggiori esperti a livello internazionale nel campo dello studio delle reazioni HAT:

- Erik J. Alexanian, University of North Carolina at Chapel Hill, USA
New Strategies for Hydrocarbon Functionalization.
- Tyler McCaslin, Georgia Institute of Technology, USA
Proton Coupled Electron Transfer in Biomimetic beta Hairpins.
- J. Martin Bollinger Jr., Pennsylvania State University, USA
Conformational Gating of Proton Coupling in the ~ 40-Å Inter-Subunit Electron-Transfer Initiation Step of a Class I Ribonucleotide Reductase.
- Marcella Bonchio, Università di Padova
Bio-inspired nano-Architectures for Artificial Photosynthesis.
- Chrysostomos Chatgililoglu, ISOF - CNR, Bologna
Relevant HAT-based Transformations of Biomolecules.
- Michelle L. Coote, Australian National University, Australia
The Fate of the Peroxyl Radical in Autoxidation.
- Keith Searles, ETH Zürich, Svizzera
Highly Active and Selective Catalysts for Propane Dehydrogenation: a Molecular Level Approach for Generating Supported Isolated Metal Sites.
- Miquel Costas, Universitat de Girona, Catalogna, Spagna
Rational Design of Catalysts for Selective C-H Oxidation and Investigation of Catalytically Competent Reaction Intermediates.
- Cyrille Costentin, Université Paris Diderot, Francia
Molecular Catalysis of CO₂ Electroreduction.
- Maurizio Fagnoni, Università di Pavia
Decatungstate Photocatalyzed C(sp³)-H Functionalization: Selectivity and Applications in Organic Synthesis.
- David P. Goldberg, Johns Hopkins University, USA
Hydrogen Atom Transfer and Related Radical Processes with High-Valent Metal-Oxo/Hydroxo Porphyrinoid Complexes.
- Michael T. Green, University of California Irvine, USA
Selenocysteine Cytochrome P450 Compound I: A Direct Link Between Electron Donation and Reactivity.
- John T. Groves, Princeton University, USA

- *Watching the Protons in C-H Bond Cleavage by Metalloenzymes and Metalloporphyrins.*
Sharon Hammes-Schiffer, University of Illinois at Urbana-Champaign, USA
Proton-Coupled Electron Transfer in Enzymes, Artificial Photosynthesis, and Nanoparticles.
- Shinobu Itoh, Osaka University, Giappone
Ligand Non-innocence in Catalytic (sp^3) C-H Bond Activation.
- Robert R. Knowles, Princeton University, USA
Proton-coupled Electron Transfer in Organic Synthesis & the Role of H-atom Transfer co-Catalysts.
- Tai-Chu Lau, City University of Hong Kong, Hong Kong, R. P. Cina
HAT Reactions of some d^2 Nitrido Complexes.
- Aiwen Lei, Wuhan University, R. P. Cina
Oxidation-Induced C-H Activation and Oxidative Cross-Coupling.
- Keiji Maruoka, Kyoto University, Giappone
New Strategy of Generating Acyl Radicals for Organic Synthesis.
- James M. Mayer, Yale University, USA
Hydrogen Atom Transfer from Molecules to Nanocrystals.
- Ana L. Moore, Arizona State University, USA
One-Electron Two-Proton Transfer Processes in Models Inspired by the Tyr-His Couple of Photosystem II.
- Wonwoo Nam, Ewha Woman's University, Corea del Sud
Biomimetic Metal-Oxygen Intermediates in Dioxygen Activation Chemistry.
- Lawrence Que Jr., University of Minnesota, USA
Pursuing the Fe(V) oxidant in Bio-inspired Nonheme Iron-Catalyzed Oxidations.
- Helmut Schwarz, Technische Universität Berlin, Germania
The Methane Challenge: C-H bond Activation by Metal Oxides and Metal Carbides - Theory and Experiment in Concert.
- Sason Shaik, The Hebrew University of Jerusalem, Israele
Reactivity Patterns: Reactivity, Selectivity and Spin-State Selectivity.
- Shannon S. Stahl, University of Wisconsin, USA
Electron-Proton-Transfer Mediators in Electrochemical Synthesis and Energy Conversion.
- Armido Studer, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Germania
Electron Catalysis.
- Nicholas J. Turner, University of Manchester, UK
Biocatalytic Hydrogen Borrowing.
- Luca Valgimigli, Università di Bologna
Exploring the Two-faced Oxidizing and Reducing Behavior of the Hydroperoxyl ($HOO\bullet$) Radical: Reaction with Nitroxides.
- Oliver Wenger, Universität Basel, Svizzera
Multielectron-Multiproton Photochemistry in Donor-Acceptor Compounds.
- Kirsten R. Wolthers, University of British Columbia, Canada
Hydride Transfer in Class B Flavin-Dependent Monooxygenases.
- Hendrik Zipse, Ludwigs Maximilians, Universität München, Germania
Initiation Chemistries in Hydrocarbon (Auto)Oxidation.

La Conferenza è stata inoltre completata da un variegato programma sociale che ha consentito ai partecipanti di beneficiare dell'ampia offerta enogastronomica e culturale fornita dal territorio dei Castelli Romani: aperitivo di benvenuto presso l'Hotel Villa Mercede di Frascati; degustazione di vino presso l'Azienda Agricola L'Olivella di Frascati; visita del complesso del Barco Borghese, sito archeologico di origine romana situato nel comune di Monte Porzio Catone; cena della Conferenza presso il Ristorante Cacciani di Frascati.