



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

## Dipartimento di Scienze della Terra e del Mare (DiSTeM)

COD. FISC. 80023730825 ~ P.IVA 00605880822

Dr. *Girolamo Casella*  
Tel. +39-091-23897969  
[girolamo.casella@unipa.it](mailto:girolamo.casella@unipa.it)

Al Direttore del Dipartimento di Scienze della Terra e  
del Mare

e p.c.

al Responsabile dell' AREA RISORSE UMANE  
SETTORE CARRIERE PROFESSORI E RICERCATORI  
u.o.b. carriere ricercatori e assistenti

--SEDI--

**Palermo, 23.07.2018**

Ai sensi dell'articolo 8 del “*Regolamento sulla concessione ai docenti, agli assistenti ordinari RE ed ai ricercatori universitari dell'autorizzazione a dedicarsi ad esclusiva attività di ricerca scientifica ai sensi dell'art. 17 del D.P.R. 11.07.1980, N.382 e dell'art. 8 (3°-6° comma) della legge 18.03.1958, n. 349*”

Il sottoscritto *Girolamo Casella*, R.U. confermato, n. matr. 161160, in servizio presso il Dipartimento di Scienze della Terra e del Mare, invia la relazione finale relativa al periodo di congedo usufruito dal 01.01.2018 al 15.07.2018 concesso con D.R. 2156, prot. 55679 del 19.07.2018.

In fede,

*Girolamo Casella*



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

Dipartimento di Scienze della Terra e del Mare (DiSTeM)

COD. FISC. 80023730825 ~ P.IVA 00605880822

RELAZIONE FINALE

PERIODO DI CONGEDO DAL 01.01.2018 AL 15.07.2018

(D.R. 2156, prot. 55679 del 19.07.2018)

## ***Dottor Girolamo Casella***

*Applicazione di metodi DFT allo studio della reattività di complessi di metalli di transizione con leganti insaturi.*



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

## Dipartimento di Scienze della Terra e del Mare (DiSTeM)

COD. FISC. 80023730825 ~ P.IVA 00605880822

Durante il periodo di congedo svolto presso il gruppo di ricerca del Prof. Maurizio Casarin, Università di Padova, mi sono occupato dello studio della reattività di complessi con metalli di transizione, principalmente con leganti insaturi, con funzioni catalitiche o come tipici intermedi di sintesi, tramite metodi DFT. In particolare sono stati studiati meccanismi di reazione e/o proprietà del legame metallo-legante per giustificare/prevedere la reattività di tali sistemi. Lo studio ha riguardato tre sistemi: complessi del Pd(II) con isocianati, complessi del Pt(II) con leganti organonitrile, complesso del Fe(II) con tris-pyrazoyl-metano. Durante i lavori, sono state attivate tre collaborazioni internazionali con: Prof. Célia Fonseca Guerra (Vrije University – AMSTERDAM) [complessi di Pt(II)], Dott. Maxim Kuznetsov (Instituto Superior Técnico – LISBONA) [complesso di Pd(II)] e Prof. Luísa M. Martins (Instituto Superior Técnico – LISBONA) [complesso di Fe(II)].

I risultati ottenuti sono stati oggetto di: i) una pubblicazione, complesso del Pd(II), su MOLECULES (2018 accepted), ii) di una comunicazione a congresso, complesso del Fe(II), *Third International Conference on Catalysis and Chemical Engineering at Houston TX, on February 25-27, 2019 (CCE-2019)*, per il complesso del Fe(II), e successiva pubblicazione in una special issue dedicata, iii) lavoro in fase di scrittura per quanto riguarda i complessi di Pt(II)