

Syllabus

1) Name and surname of Prof./Dr....: Dr. Federico Sebastiani

-Affiliation: Dipartimento di Chimica "U. Schiff" – Università di Firenze

E-mail: federico.sebastiani@unifi.it

- For details see the attached CV, including also bibliometric data (WOS and SCOPUS) and a selection of the 10 most relevant publications

2) Title of the course: "THz spectroscopy: from water to aqueous solutions of biomolecules"

3) Course content detailed per lesson of 2 h (possibly with dates and room real and virtual):

Lesson 1 (2h): THz and far-infrared spectroscopy: introduction. THz imaging.

Lesson 2 (2h): THz and far-infrared absorption spectroscopy.

Lesson 3 (2h): THz and far-infrared time-resolved spectroscopy.

Lesson 4 (2h): THz narrow-band absorption spectroscopy with insights from MD simulations.

4) Course program (150-200 words):

Terahertz (THz) frequencies span the range of low-energy excitations in electronic materials, low-frequency vibrational modes of condensed phase media, and vibrational and rotational transitions in molecules, making this a key spectral range for probing fundamental physical and chemical properties as well as for practical applications. This frequency region, broadly defined as 0.1–30 THz ($\nu=3\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$, $\lambda=3000\text{-}10\text{ }\mu\text{m}$), occupies a large portion of the electromagnetic spectrum between (and partially overlapping to) the infrared and microwave ranges.

THz radiation is an ideal tool to probe the collective intermolecular dynamics of water molecules. Such dynamics i) play an active role in the structural plasticity of proteins, ii) are involved in bio-reactions like drug intercalation into DNA, iii) are thought to be the drive of the structural rearrangements of the molecular network. The collective dynamics of the hydrogen-bonded network dictate the unique solvation properties of water, and are at the origin of the puzzling physical and chemical properties of this special liquid.

5) Suggested reading: research articles provided by the teacher

6) Learning Objectives: the aim of the course is to provide an overview of THz and far-infrared spectroscopy, introducing the fundamentals of the technique, and its applications, and briefly illustrating the ability of THz spectroscopy to study water and its interaction with biomolecules.

7) Knowledge and skills to be acquired: principles of THz and far-infrared spectroscopy for the characterization of aqueous systems and biomolecules; ability to critically use THz spectroscopy data in their own research activity.

8) Prerequisites: basic knowledge of vibrational spectroscopy

9) Teaching Methods: lectures (with slides)

10) Further information

11) Type of Assessment: written test: short essay on the topics of the course and/or on critical reading of a literature paper. The final evaluations will have to be validated maximum 1 month after the end of the course

Total hours must be: 8h frontal lessons (3 ECTS)

Period: April 19th-May 31st 2022

The lessons must be delivered online or both online and in presence. The lessons must be recorded and available to all the students that cannot take part to the lessons in streaming.

The Webex platform must be used

Curriculum sintetico **Dr. Federico Sebastiani**

2007: Laurea Triennale in Fisica (Università di Perugia), relatore Prof. Yogendra N. Srivastava.

2009: Laurea Specialistica in Fisica (Università di Perugia), relatore Prof. Andrea Orecchini.

2009-2012: Dottorato di ricerca in Fisica e Tecnologie Fisiche (Università di Perugia), relatore Prof. Andrea Orecchini, con borsa di studio dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare

6-2011 – 9-2011: Long-term visitor presso Institut Laue-Langevin (Grenoble, Francia)

Dicembre 2012- Dicembre 2013: Assegno di ricerca post-dottorato presso l'Istituto Officina dei Materiali del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR-IOM), sede di Perugia. Supervisore: Dr.ssa Lucia Comez.

Dicembre 2013- Aprile 2015: Assegno di ricerca post-dottorato presso il Dipartimento di Fisica e Geologia dell'Università di Perugia. Supervisore: Prof. Alessandro Paciaroni

Maggio 2015- Agosto 2019: Borsa di ricerca post-dottorato presso il Dipartimento di Chimica Fisica II della Ruhr-Universität Bochum e il Cluster of Excellence RESOLV (Bochum, Germania). Supervisore: Prof.ssa Martina Havenith.

Settembre 2019- ad oggi: Assegno di ricerca post-dottorato il Dipartimento di Chimica dell'Università di Firenze. Supervisore: Prof.ssa Giulietta Smulevich.

Interessi scientifici principali

Metodi di spettroscopia:

- spettroscopia neutronica e di raggi X
- spettroscopia ottica nel lontano infrarosso e THz
- spettroscopia Raman risonante
- spettroscopia di assorbimento elettronico UV-Vis

Studio di sistemi acquosi e di interesse biologico:

- studio della dinamica dell'acqua in diverse condizioni termodinamiche
- studio di interazione tra acqua e ioni, amminoacidi e DNA
- studio di interazioni tra farmaci antitumorali e DNA
- studio di relazioni tra struttura e attività in emoproteine

Produzione scientifica: è autore di 30 articoli con indicatore bibliometrico h-index = 10 e 283 citazioni (Scopus, 03/2022); è autore di 29 articoli con indicatore bibliometrico h-index = 9 e 260 citazioni (WOS, 03/2022)

Pubblicazioni scientifiche selezionate:

1. **F. Sebastiani**, S.L.P. Wolf, B. Born, T.Q. Luong, H. Cölfen, D. Gebauer, M. Havenith - “*Water dynamics from THz spectroscopy reveals the locus of a liquid-liquid binodal limit in aqueous CaCO₃ solutions*” – Angew. Chem. Int. Ed. 56, 490-495 (2017).

2. A. Esser, H. Forbert, F. Sebastiani, G. Schwaab, M. Havenith, D. Marx - “*Hydrophilic solvation dominates the Terahertz fingerprint of amino acids in water*” – J. Phys. Chem. B 122,1453-1459 (2018).
3. F. Bianchi, L. Comez, R. Biehl, F. D’Amico, A. Gessini, M. Longo, C. Masciovecchio, C. Petrillo, A. Radulescu, B. Rossi, F. Sacchetti, F. Sebastiani, N. Violini, A. Paciaroni – “*Structure of human telomere G-quadruplex in the presence of a model drug along the thermal unfolding pathway*” – *Nucleic Acids Res.* 46, 11927-11938 (2018).
4. G. Schwaab, F. Sebastiani, M. Havenith - “*Ion hydration and ion pairing by THz spectroscopy*” – *Angew. Chem. Int. Ed.* 58, 3000-3013 (2019).
5. S. Funke, F. Sebastiani, G. Schwaab, M. Havenith – “*Spectroscopic fingerprints in the low frequency spectrum of ice (Ih), clathrate hydrates, supercooled water, and hydrophobic hydration reveal similarities in the hydrogen bond network motifs*” - J. Chem. Phys. 150, 224505 (2019).
6. V. Conti Nibali, S. Pezzotti, F. Sebastiani*, D.R. Galimberti, G. Schwaab, M. Heyden, M-P. Gaigeot, M. Havenith - “*Wrapping up hydrophobic hydration: Locality matters*” – J. Phys. Chem. Lett. 11, 4809–4816 (2020). * Shared first authorship.
7. F. Sebastiani, T.A. Bender, S. Pezzotti, W-L. Li, G. Schwaab, R.G. Bergman, K.N. Raymond, F.D. Toste, T. Head-Gordon, M. Havenith – “*An isolated water droplet in the aqueous solution of a supramolecular tetrahedral cage*” - Proc. Natl. Acad. Sci. USA 117, 32954–32961 (2020).
8. F. Sebastiani, C.Y. Ma, S. Funke, A. Bäumer, D. Decka, C. Hoberg, A. Esser, H. Forbert, G. Schwaab, D. Marx, M. Havenith – “*Probing local electrostatics of glycine in aqueous solution by THz spectroscopy*” – *Angew. Chem. Int. Ed.* 60, 3768-3772 (2021).
9. F. Sebastiani, H. Michlits, B. Lier, M. Becucci, P.G. Furtmüller, C. Oostenbrink, C. Obinger, S. Hofbauer, G. Smulevich - “*Reaction intermediate rotation during the decarboxylation of coproheme to heme b in C.diphtheriae*” – *Biophys. J.* 120, 3600-3614 (2021).
10. T. Gabler, F. Sebastiani, J. Helm, A. Dali, C. Obinger, P.G. Furtmüller, G. Smulevich, S. Hofbauer – “*Substrate specificity and complex stability of coproporphyrin ferrochelatase is governed by hydrogen-bonding interactions of the four propionate groups*” – *The FEBS J.* (2022) - <https://doi.org/10.1111/febs.16257>

Attività didattica:

Corso di Fisica Generale, Corso di Laurea Triennale in Biologia, Università degli Studi di Perugia AA. 2012/2013 – Lezioni frontali ed esercitazioni

Corso di Fisica, Corso di Laurea Triennale in Ingegneria Civile, Università degli Studi di Perugia AA. 2013/2014 – Lezioni frontali ed esercitazioni

Corso di Fisica Generale, Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia AA. 2014/2015 – Esercitazioni e supporto alla didattica

Corso di laboratorio avanzato di Spettroscopia THz e lontano infrarosso per il Corso di Laurea Specialistica in Chimica, in Biochimica e per International Master Program in Molecular Sciences, Università della Ruhr, AA. 2015-2016 – AA. 2016/2017 – AA. 2017-2018 – AA. 2018-2019

Titolare del corso di “THz spectroscopy: from water to biomolecules in solution”, Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, Università degli Studi di Firenze AA. 2020/2021

Cultore della materia in Chimica Fisica (CHIM/02) da Marzo 2020 presso Università di Firenze

Co-relatore di tre tesi di laurea magistrale a ciclo unico in “Chimica e Tecnologie Farmaceutiche” presso Università di Firenze

Co-supervisione di studenti di laurea triennale, di laurea magistrale e di dottorato