



**UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI TRIESTE**

Area dei Servizi Istituzionali  
Unità di staff Dottorati di ricerca



ULTIMA REVISIONE 7 ottobre 2021

**CHIMICA  
CHEMISTRY**

Borsa PON/13	SCHOLARSHIP PON/13
<p><b>Presenza e rimozione di componenti patogene nel nano- e micro- bioaerosol ambientale: sviluppo ed applicazione di tecnologie integrate e procedure per la caratterizzazione e la mitigazione del rischio di esposizione inalatoria.</b></p> <p>Il progetto di dottorato si focalizza sullo sviluppo di procedure di campionamento di aerosol veicolanti significative componenti microbiologiche con mode dimensionali sub-micrometriche, che garantiscano elevata efficienza di raccolta di particelle nanometriche a micrometriche, mantenendo l'integrità e la capacità di replicazione di agenti microbici, tramite tecnologie di crescita di particelle per condensazione moderata in flusso laminare con vapore acqueo (doi: 10.1080/02786826.2014.881460). La focalizzazione iniziale del progetto di dottorato è sullo sviluppo e la validazione metrologica di procedure per la rilevazione di SARS-CoV-2 negli aerosol ambientali; lo sviluppo ulteriore del progetto considererà batteri antibiotico resistenti (Multi-Drug Resistant Organisms). Parallelamente, studi sperimentali con aerosolizzazioni di microorganismi in laboratorio di biosicurezza BSL3 saranno volti alla messa a punto di sistemi di valutazione robusti per tecnologie di trattamento chimico, fisico e fotochimico dell'aria, operanti a flussi d'interesse applicativo, nel settore sanitario e della progettazione di ambienti di vita intelligenti. Studi su sistemi di trattamento dell'aria indoor, terranno conto di ricambi e trattamento d'aria ed efficienza energetica degli edifici. La progettazione e realizzazione di infrastrutture e treni di tecnologie necessari a valutare l'efficacia di filtrazione di virus e batteri veicolati da particolato atmosferico beneficerà delle competenze su tecnologie degli aerosol di TCR Tecora SRL (Cogliate – MB). Il/la dottorando/a trascorrerà presso l'azienda almeno 6 mesi di ricerca mirata alla messa a punto di sistemi di aerosolizzazione, campionamento ed analisi di bioaerosol, anche impiegando sistemi di rilevazione avanzati, quali biosensori e contatori di particelle evoluti. Le camere per la generazione controllata di aerosol con controllo di temperatura, umidità, irraggiamento sviluppate, verranno impiegate per studiare fenomeni di coagulazione tra bioaerosol patogeni e particolati atmosferici separatamente generati e con</p>	<p><b>Presence and removal of pathogenic components in the environmental nano- and micro-bioaerosol: development and application of integrated technologies and procedures for the characterization and mitigation of the risk of inhalation exposure.</b></p> <p>The PhD project focuses on the development of sampling procedures for aerosols carrying significant microbiological components with sub-micrometric dimensional modes, which guarantee high collection efficiency from nanometer to micrometer unit sizes, while maintaining the integrity and replication capacity of microbial agents, through moderated condensation growth technologies for particles in laminar flow with water vapor (doi: 10.1080 / 02786826.2014.881460). The initial focus of the PhD project is on the development and metrological validation of procedures for the detection of SARS-CoV-2 in environmental aerosols; further development of the project will consider antibiotic-resistant bacteria (Multi-Drug Resistant Organisms). At the same time, experimental studies with aerosolization of microorganisms in the BSL3 biosafety laboratory will be aimed at the development of robust evaluation systems for chemical, physical and photochemical air treatment technologies, operating at flows of applicative interest, in the health and design of intelligent living environments. Studies on indoor air treatment systems will take into account air exchanges and treatment and energy efficiency of buildings. The design and construction of infrastructures and technology trains necessary to evaluate the effectiveness of filtration of viruses and bacteria carried by atmospheric particles will benefit from the expertise on aerosol technologies of TCR Tecora SRL (Cogliate - MB). The PhD student will spend at least 6 months of research at the company aimed at the development of aerosolization, sampling and bioaerosol analysis systems, also using advanced detection systems, such as biosensors and advanced particle counters. The chambers for the controlled generation of aerosols with temperature, humidity, irradiation control developed, will be used to study coagulation phenomena between pathogenic bioaerosols and atmospheric particulates separately generated and with different chemical</p>

<p>diversa composizione chimica (es. carboniosi, salini), valutando effetti di persistenza o inibizione di infettività. Le tecnologie di campionamento messe a punto, verranno adattate infine ed applicate in funzione di sentinella di comunità per la presenza di patogeni con focalizzazione sugli aerosol generati nelle fasi di aereazione in un impianto di trattamento di reflui urbani. Indagini meta-genomiche sono previste in collaborazione con il Dipartimento di Scienze della Vita dell'ateneo triestino e con atenei stranieri (es. Department of Biological and Environmental Sciences, Qatar University), sviluppando modelli per programmare e realizzare una raccolta di informazione genetica ambientale relativa alla presenza di patogeni nelle comunità, per evidenziare la comparsa e monitorare l'evoluzione di malattie infettive con impatto sociale, a supporto delle politiche sanitarie.</p>	<p>composition (e.g. carbonaceous, saline), evaluating persistence effects or inhibition of infectivity. The sampling technologies developed will finally be adapted and applied as a community sentinel for the presence of pathogens with focus on the aerosols generated in the aeration phases in an urban wastewater treatment plant. Meta-genomic investigations are planned in collaboration with the Department of Life Sciences of the University of Trieste and with foreign universities (e.g. Department of Biological and Environmental Sciences, Qatar University), developing models to plan and implement a collection of environmental genetic information relating to the presence of pathogens in communities, to highlight the emergence and monitor the evolution of infectious diseases with social impact, in support of health policies.</p>
--	--

Borsa PON/14	SCHOLARSHIP PON/14
<p><b>Poliiolefine funzionalizzate: macromolecole promettenti per il riciclo chimico dei materiali plastici.</b></p> <p>Le poliolefine, in particolare polietilene e polipropilene, con la loro produzione mondiale, pari a 200 milioni di tonnellate nel 2019, rappresentano quasi la metà dei materiali plastici prodotti. Grazie alle loro proprietà i materiali plastici trovano applicazione in moltissimi settori, da quello automobilistico, a quello del confezionamento alimentare (packaging), ai dispositivi medicali, etc.. Tuttavia l'elevata stabilità dei materiali plastici è un'arma a doppio taglio, in quanto sta alla base dell'inquinamento ambientale causato dal loro uso massiccio. Attualmente più del 65 % dei rifiuti plastici raccolti è destinato all'incenerimento o alle discariche. E' quindi necessaria una repentina transizione dal modello end-of-life lineare ad un modello end-of-life circolare.</p> <p>A questo scopo, il riciclo chimico, complementare al riciclo meccanico, rappresenta l'opzione emergente, e tra i vari possibili approcci il più innovativo è quello basato sul concetto di Design for Recycling (Progettati per il Riciclo), che consiste nel rendere più facile la conversione di polietilene e polipropilene nei relativi monomeri e/o oligomeri, se i polimeri costituenti la plastica vengono progettati con in mente il riciclo del materiale stesso.</p> <p>L'incorporazione nello scheletro delle poliolefine di gruppi funzionali polari, ottenendo le cosiddette poliolefine funzionalizzate (FPO), permetterebbe di attivare una depolimerizzazione controllata e più facile di quella delle poliolefine semplici.</p> <p>Obiettivo principale del presente progetto di ricerca è lo sviluppo di sistemi catalitici omogenei altamente efficienti per la produzione di FPO.</p> <p>La copolimerizzazione diretta e controllata, via catalisi omogenea, di etilene (o propilene) con monomeri vinilici polari rappresenta l'approccio più promettente ed eco-sostenibile per l'ottenimento di</p>	<p><b>Functionalized polyolefins: promising macromolecules for chemical recycling of thermoplastic materials.</b></p> <p>Our Society relies on the use of plastic materials, whose global production reached the value of 400 million tons in 2019, and polyolefin materials, such as polyethylene and polypropylene, account for almost half of it. This is in part due to their tunable properties that make them suitable for a wide range of applications. However, at the same time the excellent stability of many commodity plastics is at the base of their environmental pollution. Currently, more than 65 % of collected plastic waste is incinerated or goes to a landfill. Thus, plastic waste has developed into a pressing problem and a urgent turn from linear end-of-life to circular end-of-life treatments is strongly required.</p> <p>With this aim, chemical recycling will complement mechanical recycling and will play an important role as plastic use can be decreased only to a limited extend. As for chemical recycling, the most innovative approach is based on the Design for Recycling concept that will render the conversion of polyethylene and polypropylene into monomers and/or oligomers easier to be achieved if plastics are designed with recycling in mind. In this respect, the introduction into the polyolefin skeleton of polar functional groups, leading to the so called functionalized polyolefins (FPO), allows to trigger controlled polymer degradation making, at the same time, depolymerization processes easier than for the simple polyolefins.</p> <p>The main target of this project deals with the development of highly efficient homogeneous catalysts for the production of FPO. Indeed, the direct controlled, homogeneously catalyzed, copolymerization of ethylene with polar vinyl monomers represent the most environmentally friendly approach to achieve it.</p> <p>The research strategy of this project is based on the</p>

<p>FPO.</p> <p>La strategia di ricerca del presente progetto si basa sullo studio di complessi dinucleari caratterizzati da due ioni di metalli di transizione, che, grazie all'uso di opportuni leganti multidentati, vengano a trovarsi in prossimità l'uno all'altro, in modo da avere delle prestazioni catalitiche che siano il risultato di effetti sinergici, invece che la semplice somma delle attività di due centri catalitici indipendenti.</p> <p>L'attività di ricerca si articola in 5 stadi:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) costruzione di una libreria di leganti multidentati;</li> <li>2) sintesi e caratterizzazione dei complessi dinucleari;</li> <li>3) studio del loro comportamento catalitico nella copolimerizzazione etilene/monomeri polari;</li> <li>4) caratterizzazione delle FPO prodotte;</li> <li>5) studi meccanicistici.</li> </ol> <p>Il presente progetto di ricerca nasce da una collaborazione con la Basell Poliolefine Italia S.r.l. una società del gruppo LyondellBasell, industria chimica leader mondiale per la produzione di poliolefine. E' previsto che il dottorando passi 6 mesi svolgendo attività di ricerca presso il Centro Ricerche Giulia Natta nel sito di Ferrara dell'industria.</p>	<p>investigation of dinuclear complexes characterized by two late transition metal ions, that, thanks to the use of proper multidentate ligands, are located in close proximity one to each other showing catalytic performances that are the result of cooperative effects and not the simple sum of performances of two independent catalytic centers.</p> <p>The research activity is divided into 5 steps:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) the build up of a library of multidentate ligands</li> <li>2) the synthesis and characterization of dinuclear complexes, the precatalysts;</li> <li>3) the detailed investigation of their catalytic behavior in the ethylene/polar vinyl monomer copolymerization;</li> <li>4) the characterization of the obtained FPO;</li> <li>5) mechanistic studies.</li> </ol> <p>This research project is the result of a collaboration with Basell Poliolefine Italia S.r.l., a Company of the LyondellBasell group, the leading worldwide company for the production of polyolefins. It is foreseen that the PhD student will spend 6 months doing research activity at Centro Ricerche Giulio Natta in Ferrara site of the Company.</p>
---	---

Borsa PON/15	SCHOLARSHIP PON/15
<p><b>Catalisi confinata in materiali multistrato per produzione sostenibile di idrogeno mediante splitting dell'acqua</b></p> <p>Abstract del progetto</p> <p>L'obiettivo generale del progetto è implementare il concetto di catalisi confinata per il processo efficiente di splitting elettrochimico dell'acqua (water splitting, WS), utilizzando i gap di van der Waals (vdW) di nanomateriali stratificati 2D come microambiente confinante, e ossidi metallici misti come specie attive da confinare.</p> <p>A seconda del processo utilizzato, la scissione dell'acqua può essere catalizzata da una tensione esterna applicata (elettrocatalisi) o dall'energia solare (fotocatalisi). Il processo elettrocatalitico di WS comporta la decomposizione dell'acqua in ossigeno e idrogeno in risposta ad una corrente elettrica che passa attraverso l'acqua. Esso coinvolge due semi-reazioni, la reazione di evoluzione dell'idrogeno (HER), che ha luogo al catodo, e la reazione di evoluzione dell'ossigeno (OER), che ha luogo all'anodo.</p> <p>In questo progetto viene proposto un nuovo tipo di catalisi, nota come catalisi confinata, utilizzando materiali 2D innovativi e sostenibili, come i dicalcogenuri di metalli di transizione.</p> <p>Questi sistemi bidimensionali sono naturalmente stratificati, con spazi vuoti di vdW tra i singoli strati che possono costituire una piattaforma utile per</p>	<p><b>Confined catalysis in layered materials for the sustainable hydrogen production through water splitting</b></p> <p>Abstract</p> <p>The overall research aim is to implement the concept of confined catalysis for efficient water splitting (WS) using the van der Waals (vdW) gaps of 2D layered materials as a confining microenvironment, and mixed metal oxides as active species to be confined.</p> <p>Depending on the type of external energy supply, water splitting (WS) can be catalyzed either by an external voltage (electrocatalysis) or by solar energy (photocatalysis). The electrocatalytic process of WS involves the decomposition of water into oxygen and hydrogen gas in response to an electric current passing through the water. It constitutes two half reactions, hydrogen evolution reaction (HER) taking place at cathode and oxygen evolution reaction (OER) taking place at anode.</p> <p>This project proposes a new type of catalysis known as confined catalysis by using innovative 2D environmentally friendly materials, such as 2D transition metal dichalcogenides. These materials are layered in their nature having van der Waals gaps between individual layers that can be a convenient platform to confine another active catalyst in them (oxo-hydroxy metal nanoparticles).</p> <p>This strategy has an impressive potential to</p>

<p>confinare un ulteriore catalizzatore attivo al loro interno (es. nanoparticelle di osso-idrossidi metallici). Questa recente strategia ha un potenziale impressionante per rivoluzionare il campo della catalisi, offrendo una nuova possibilità per la produzione di H<sub>2</sub> a basso costo.</p> <p>Si intende perseguire i seguenti obiettivi specifici di ricerca:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Sintesi e caratterizzazione chimico-fisica, strutturale, morfologica, ottica ed elettrochimica di dicalcogenuri stratificati 2D e loro etero-strutture, per le promettenti prestazioni nel catalizzare la reazione HER.</li> <li>- Confinamento di nanoparticelle di osso-idrossidi metallici.</li> <li>- Studio del meccanismo delle reazioni di splitting dell'acqua tramite calcoli DFT.</li> <li>- Studio dei nuovi catalizzatori in campioni di acqua acida, neutra, alcalina, sintetica e reale, con ottimizzazione e selezione dei sistemi più promettenti (periodo di 8 mesi presso i laboratori dell'azienda ChEERS srl - Circular Economy for Energetic Recycling Solutions).</li> <li>- Scalabilità di catalizzatori selezionati e produzione di idrogeno su impianto pilota (periodo all'estero presso il Center for Hydrogen Energy Systems Sweden - CH2ESS, di Luleå University of Technology LTU, Svezia).</li> </ul> <p>Uno degli aspetti più innovativi del progetto è che può portare alla produzione di idrogeno dall'acqua di mare. La sfida più seria nella scissione dell'acqua di mare è la competizione degli ioni cloruro (~0.5 M nell'acqua di mare). La catalisi selettiva OER sulla generazione di cloro può essere ottenuta a pH alcalino da catalizzatori attivi con basso onset potential.</p>	<p>revolutionize the catalysis field, endowing a new chance for low-cost and affordable H<sub>2</sub> production.</p> <p>The following specific research objectives will be pursued in this research project:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Synthesis and physico-chemical, structural, morphological, optical and electrochemical characterization of 2D layered dichalcogenides and their confined hetero-structures, owing to their promising performances in catalyzing HER.</li> <li>- Confinement of metal oxyhydroxides nanoparticles in the vdW gaps of the 2D layered materials.</li> <li>- Comprehensive understanding on the mechanism of water splitting reactions by using modelling/simulations through DFT calculations.</li> <li>- Investigation of the catalysts in acidic, neutral, alkaline, synthetic, and real water samples, with optimization of the most promising systems (8-month period at the ChEERS srl Company laboratories).</li> <li>- Scale-up of selected catalysts and hydrogen production on a pilot plant (period abroad at the Center for Hydrogen Energy Systems Sweden - CH2ESS, of Luleå University of Technology LTU, Sweden).</li> </ul> <p>One of the most innovative aspects of this project is that it could lead to production of hydrogen from sea water (the most abundant water resource). The most serious challenge in sea water splitting is the competition by chloride ions (~0.5 M in seawater). Selective OER catalysis over chlorine generation may be achieved in alkaline pH by active catalysts with low onset potential.</p>
--	---

Borsa PON/16	SCHOLARSHIP PON/16
<p><b>Enzimi per l'idrolisi e il riciclo delle poliammidi: integrazione di approcci di <i>machine-learning</i> e cristallografici per migliorare la circolarità delle plastiche.</b></p> <p>Nonostante i loro benefici per diverse applicazioni, le plastiche rappresentano una minaccia dal punto di vista ambientale. Considerando il loro fine-vita, degradazione e riciclo sono spesso meno redditizi dell'accumulo. Le attuali strategie di riciclo smaltiscono i materiali senza sfruttare il residuo valore dei monomeri. Una strategia che consenta il recupero dei preziosi componenti monomerici dei rifiuti plastici porterebbe anche il materiale polimerico più resistente direttamente nell'ambito dell'economia circolare. Monomeri ottenuti da una degradazione controllata e non distruttiva dei polimeri plastici potrebbero essere riutilizzati in processi industriali, trasformando la plastica da un inquinante a una fonte conveniente di <i>building block</i></p>	<p><b>Enzymes for polyamide hydrolysis and recycling: integration of machine-learning and crystallographic approaches for improving plastics circularity.</b></p> <p>Despite their numerous benefits for different applications, plastics represent an environmental threat. Considering their end-of-life, degradation is difficult and recycling is often less profitable than accumulation. Current recycling strategies dispose of materials without taking advantage of the remaining worth hidden into the monomers of each polymer. A strategy that allows for the retrieval of the valuable monomeric components of plastic waste would bring even the most resistant polymeric material directly into the realm of the circular economy. Monomers derived from a controlled non-destructive degradation of plastic polymers could be re-used in industrial processes, turning plastic from a pollutant to a cost-effective source of renewed</p>

<p>rinnovati.</p> <p>Le poliammidi, come i Nylon, devono il loro successo alla resistenza alla digestione sia chimica che enzimatica. I Nylon sono tra i polimeri più difficili da trattare e la degradazione chimica porta solo alla modifica irreversibile della struttura monomerica. Una via promettente è lo sviluppo di biocatalizzatori ispirati alla grande varietà di idrolasi naturali [1]. Strategie di <i>machine learning</i> e intelligenza artificiale forniscono strumenti per implementare l'eco-design e la circolarità dei polimeri, integrando e automatizzando gli strumenti di simulazione. Partendo da precedenti prove su come l'attività amidasica delle idrolasi può essere ingegnerizzata e ottimizzata attraverso la mutagenesi guidata da risultati computazionali [1], il dottorando utilizzerà un flusso di lavoro che integra metodi computazionali e sperimentali per progettare, produrre e caratterizzare nuovi biocatalizzatori in grado di degradare le poliammidi in monomeri.</p> <p>Partendo da un numero ristretto di scaffold bioispirati (cutinasi già ottimizzate nel gruppo della Prof.ssa Lucia Gardossi) e da residui <i>hot-spot</i> identificati da studi precedenti [2], in collaborazione con ESTECO S.p.a., le proprietà dei nuovi enzimi saranno adattate <i>in silico</i> in un protocollo automatizzato per calcolare generazioni di strutture proteiche mutate [3], utilizzando funzioni di <i>score</i> basate su dati sperimentali raccolti dalla letteratura. Verranno espresse 20 sequenze della prima generazione di enzimi e l'analisi cristallografica fornirà un modello 3D delle proteine, utilizzato come solida base sperimentale per ottimizzare le funzioni di <i>score</i> per il protocollo automatizzato. Una seconda generazione di enzimi ottenuti dall'approccio di <i>machine learning</i> verrà espressa e ne sarà misurata l'attività verso poliammidi di rilevanza industriale in diverse condizioni di reazione, con il supporto di aziende leader nel campo delle poliammidi. Questo lavoro porrà le condizioni preliminari per lo sviluppo di impianti industriali dedicati all'idrolisi delle poliammidi e al recupero dei monomeri.</p> <p>[1] Ferrario V. <i>et al.</i>, PLoS ONE 2014, 9(10):e109354  [2] S. Fortuna S. <i>et al.</i>, Catalysts 2021, 11(7):784  [3] Ferrario V. <i>et al.</i>, J. Mol. Cat. B: Enzymatic 2014, 101:7–15</p>	<p>building blocks.</p> <p>Polyamides, such as Nylons, owe their incredible success to the very characteristic of resistance to chemical and enzymatic digestion. Nylons are among the most intractable polymers and chemical degradation leads only to the non-reversible alteration of the monomer structure. A promising route is the development of biocatalysts inspired by the great variety of natural hydrolases [1]. Machine learning and artificial intelligence provide tools to implement eco-design and circularity of polymers by integrating and automating simulation tools. Starting from previous evidence on how amidase activity of hydrolases can be engineered and tuned through computationally designed mutagenesis [1], the Ph.D. student will use a computational and experimental integrated workflow to design, produce and characterize new biocatalysts able to biodegrade polyamides into monomers.</p> <p>The starting point will be a restricted number of bio-inspired scaffolds, i.e. cutinase enzymes already optimized in the group of Prof. Lucia Gardossi, and hot-spot residues identified from previous studies [2]. In collaboration with ESTECO S.p.a., the properties of the new enzymes will be tailored <i>in silico</i> by integrating structural models into an automated workflow able to compute generations of mutated protein structures [3], using scoring functions based on experimental data gathered from the literature. 20 sequences of the first generation of enzymes will be expressed and the crystallographic analysis will afford a 3D model of the proteins, as a robust experimental basis to optimize scoring functions for the automated workflow. A second generation of enzymes obtained from the machine-learning approach will be expressed and the activity towards polyamides of industrial relevance will be characterized under different reaction conditions, with the support of industry leaders in the field of polyamide fibers. This work will set some preliminary conditions for the development of industrial plants dedicated to the hydrolysis of polyamides and recovery of monomers.</p> <p>[1] Ferrario V. <i>et al.</i>, PLoS ONE 2014, 9(10):e109354  [2] S. Fortuna S. <i>et al.</i>, Catalysts 2021, 11(7):784  [3] Ferrario V. <i>et al.</i>, J. Mol. Cat. B: Enzymatic 2014, 101:7–15</p>
---	--

Borsa PON/17	SCHOLARSHIP PON/17
<p><b>Sviluppo di coatings ad alte prestazioni a base di lignina.</b></p> <p>La lignina, il più abbondante biopolimero aromatico, viene ottenuta sottoforma di scarto di industrie cartarie e moderne bioraffinerie in oltre 70 Mt/anno. Date la complessità e variabilità strutturali, già presenti naturalmente e acuite dalle condizioni altamente aggressive utilizzate nei processi di estrazione dalla biomassa lignocellulosica, la lignina viene principalmente bruciata per produrre energia</p>	<p><b>Development of lignin-based high-performance sustainable coatings.</b></p> <p>Lignin, the most abundant aromatic biopolymer on Earth, is obtained as byproduct of the pulp and paper and modern biorefinery processes in more than 70 Mt/year. Its structural complexity and variability, already present in nature and further enhanced by the harsh conditions employed for the extraction from lignocellulosic biomass, hamper the full valorization of this material, which is thus mostly</p>

<p>o, in percentuale minore, impiegata in applicazioni a basso valore aggiunto. D'altro canto, interessanti proprietà quali biocompatibilità e biodegradabilità, capacità antiossidante, antimicrobica e di schermo-UV, unite a caratteristiche chimico-fisiche uniche tra cui varietà di gruppi funzionali e abilità di <i>self-assembly</i>, rendono la lignina un materiale con potenzialità enormi.</p> <p>In tale ambito si inserisce il presente progetto di dottorato, finalizzato alla valorizzazione della lignina attraverso lo sviluppo di <i>coatings bio-based</i> di interesse industriale. L'attività di ricerca, realizzata in stretta collaborazione con un'azienda leader mondiale nel settore, si prefigge da un lato di preparare nanoparticelle di lignina (LNPs) da implementarsi in formulazioni esistenti, allo scopo di migliorare le performance del prodotto ed incrementarne il grado di sostenibilità, dall'altro di sviluppare un prodotto nuovo, completamente a base di lignina, in grado di competere come alternativa <i>green</i> a quanto attualmente presente sul mercato.</p> <p>Al fine di modulare le proprietà chimico-fisiche delle lignine utilizzate ed ottenere matrici di partenza con proprietà più omogenee saranno presi in esame ed ottimizzati processi di frazionamento sia con solvente sia tramite l'impiego di membrane. Dopo accurata caratterizzazione per mezzo di tecniche cromatografiche e spettroscopiche che consentano di determinarne la struttura chimica, frazioni opportunamente selezionate saranno i) utilizzate per la produzione di LNPs attraverso metodologie semplici, scalabili e sostenibili e ii) sottoposte a processi di funzionalizzazione, con particolare attenzione alla catalisi enzimatica, al fine di modularne opportunamente reattività e proprietà funzionali (e.g. solubilità, idrofilicità) per la realizzazione dei nuovi coatings. Le proprietà fisico-meccaniche dei coatings nanostrutturati e totalmente a base di lignina saranno infine comparate al benchmark ed eventualmente ulteriormente migliorate attraverso processi iterativi di ottimizzazione. Ulteriori test, condotti sui campioni più promettenti, permetteranno di verificare proprietà funzionali quali stabilità a pH e temperatura, resistenza ai raggi UV, attività antimicrobica.</p>	<p>burned for energy production or, to a lesser extent, employed in low-value applications. Nevertheless, lignin possesses numerous peculiar features such as biocompatibility and biodegradability, antioxidant, antimicrobial and UV-shielding capacity together with a great variety of functional groups and self-assembly ability that make it a highly interesting material.</p> <p>In this context, the present PhD project aims at valorize lignin through the development of biobased coatings of industrial interest. The research activity, carried out in close collaboration with a world-leader company, will see on the one hand the generation of lignin nanoparticles (LNPs) to be added to existing formulations with the purpose of increasing the performances of the product and enhance its degree of sustainability and, on the other hand, the development of an innovative product, fully based on lignin, capable of competing as greener alternative of the commercially available solutions.</p> <p>To modulate the physic-chemical properties of the chosen lignins and to yield starting materials with more homogeneous characteristics, solvent-based and membrane-based fractionation strategies will be investigated and optimized. After careful characterization performed to determine their chemical structure, selected fractions will be i) used for the production of LNPs by means of simple, scalable and sustainable methodologies and ii) further functionalized to tailor their reactivity and functional properties (such as solubility and hydrophilicity) towards the fabrication of the new lignin-based coatings. The physic-mechanical behavior of the so-obtained coatings will be compared to the benchmark and, if needed, further optimized through iterative optimization processes. Last, but not least, further testing will be performed on the most promising samples to analyze more advanced features such as pH and temperature stability, UV resistance and antimicrobial activity.</p>
--	--

Borsa PON/18	SCHOLARSHIP PON/18
<p><b>Applicazione di approcci Green in un programma di Early Drug Discovery.</b></p> <p>Il processo di scoperta di un farmaco ha un elevato impatto ambientale. Infatti, lo sviluppo passa attraverso l'identificazione dei composti hit e lead, che si traduce nella sintesi e caratterizzazione chimica, biologica e metabolica di ampie serie di composti, con lo scopo di selezionare, forse alla fine, un composto candidato per l'accesso alla fase preclinica. In aggiunta, gli approcci sintetici generalmente utilizzati in questa fase del processo non sono orientati verso il rispetto dell'ambiente perché lo scopo è quello di ottenere composti in un</p>	<p><b>Application of Green Approaches in an Early Drug Discovery Program.</b></p> <p>Drug discovery process has a high environmental impact. In fact, the development has to pass through hit and lead compounds identification, which relies in the synthesis and chemical, biological, and metabolic characterization of large series of molecules to select, in the end, maybe, one candidate compound for preclinical phase. In addition, synthesis approaches generally applied at this stage are not environmental oriented because the aim is to obtain compounds in a short time and in a reliable way. The objective of this project is</p>

<p>tempo breve, utilizzando procedure certe ed affidabili. L'obiettivo di questo progetto è di portare a termine un processo di drug discovery ad impatto ambientale minimo, che possa poi essere generalmente applicato a diversi bersagli. Gli obiettivi saranno raggiunti agendo su due diversi fronti:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Minimizzare il numero di composti sintetizzati con l'aiuto di tecniche computazionali che comprendono approcci di screening virtuale e strumenti per la predizione e ottimizzazione delle proprietà DMPK/ADME (drug metabolism and pharmacokinetics: metabolismo e farmacocinetica del farmaco/assorbimento, distribuzione, metabolismo, eliminazione) dei composti, tenendo quindi in considerazione sia la farmacodinamica che la farmacocinetica prima di procedere con la sintesi.</li> <li>2) Progettare vie sintetiche applicando principi affidabili di chimica verde (es. selezione di solventi e reagenti sostenibili, reazioni senza solvente, reazioni assistite da microonde, trasformazioni sostenibili per la costruzione di strutture eterocicliche).</li> </ol> <p>Il bersaglio molecolare del progetto verrà selezionato in accordo con l'azienda.</p>	<p>carry out an early drug discovery process minimizing its environmental impact that could be then generally applied to different targets. The aims will be achieved acting on two different aspects:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Minimize the number of synthesized compounds with the help of computational techniques that comprise virtual screening approaches and tools to predict and optimize the DMPK/ADME properties of compounds, thus taking in consideration both pharmacodynamics and pharmacokinetic properties before synthesis.</li> <li>2) Design synthesis paths applying reliable green chemistry principles (i.e. selection of sustainable solvents and reagents; solventless reactions; microwave-assisted reactions; sustainable transformation for the construction of heterocyclic scaffolds).</li> </ol> <p>The molecular target of the project will be selected according with the company.</p>
--	---