

# DOTTORATO IN SCIENZE CHIMICHE

## PROGETTO ED OBIETTIVI DEL DOTTORATO

### *Testo in italiano*

La proposta di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche nasce dalla realtà operativa del Dipartimento di Chimica come concentrazione di competenze scientifiche qualificate ed affini sviluppatesi attorno a temi di ricerca che ricoprono buona parte dell'area globale della ricerca chimica. Sono identificabili cinque aree fondamentali che possono essere indicate come: Chimica Analitica ed Ambientale; Chimica Fisica, Strutturale e Computazionale; Fotochimica e Fotocatalisi; Sintesi e Reattività Inorganica; Sintesi e Reattività Organica.

Le tematiche disciplinari si presentano in forma omogenea ed integrata, raggruppabili essenzialmente attorno a problemi di reattività chimica da un lato e di metodologie analitiche e chimico fisiche di indagine dall'altro, necessariamente interagenti fra loro a costituire un ampio dominio di ricerca fortemente caratterizzato. Le cinque aree sono dotate di propri laboratori completamente attrezzati ai fini di una ricerca scientifica avanzata e, di conseguenza, per il buon fine del Dottorato. L'attrezzatura dei laboratori è integrata da diverse grandi apparecchiature gestite in forma comunitaria.

Le attività di ricerca sopraesposte sono fortemente integrate a livello internazionale in vista di

- i) collaborazioni con laboratori internazionali qualificati spesso stabilite nell'ambito di progetti dell'UE;
- ii) collaborazioni con aziende ed industrie tramite contratti di ricerca finalizzati o convenzioni di dottorato;
- iii) disponibilità di molti laboratori nazionali e stranieri, pubblici e privati ad accogliere i nostri studenti.

I Dottori di Ricerca, quale che sia il particolare cammino formativo prescelto, saranno caratterizzati da elevata qualificazione, esperienza e capacità di progettare e condurre autonome ricerche scientifiche in campi tecnologicamente avanzati; saranno pronti ad assumere posizioni di responsabilità in enti di ricerca pubblici (ivi inclusa la carriera universitaria) e privati, nonché nel mondo dell'industria.

### *Testo in inglese*

The doctorate in Chemical Sciences originates from consciousness within the Department of Chemistry of its highly qualified scientific competence developed over the years in research covering most areas of chemical investigations. Specifically, five fundamental areas can be mentioned: Analytical and Environmental Chemistry; Physical, Structural and Computational Chemistry; Inorganic Synthesis and Reactivity; Organic Synthesis and Reactivity.

Research topics form a homogeneous and interconnected body, where two main directions can be singled out, i.e., chemical reactivity and analytical and physical chemical investigation methodologies.

All laboratories active in the areas represented are well equipped to carry on advanced research and are then able to guarantee the high level of preparation that the Doctorate requires. Routine apparatus present in the single laboratories is well integrated by large, more advanced instrumentation which can be accessed by all groups.

The research activities benefit from various collaborations with international research institutions, which is of paramount importance in view of:

- i) access to international and EU projects
- ii) collaborations with private companies and industries through research contracts which can possibly provide grants to support graduate students
- iii) the possibility for our students to carry on research at either public or private foreign laboratories.

Independently from the branch of chemical research chosen, Doctors of Chemical Science will be highly qualified and will be able to undertake independent advanced research. They will be ready to hold responsibility positions in academic as well as in industrial institutions.

## DESCRIZIONE TEMATICHE DI RICERCA

	<b>Descrizione tematica di ricerca</b>
<b>1</b>	<p><b>Chimica Analitica ed Ambientale</b></p> <p>La Chimica Analitica rappresenta un'area fondamentale delle discipline chimiche ed il suo scopo specifico è quello di fornire metodi e strategie per la caratterizzazione dei sistemi materiali da un punto di vista chimico. L'apporto della Chimica Analitica risulta pertanto fondamentale per lo sviluppo scientifico e tecnologico di settori tradizionale ed emergenti: prodotti chimici e materiali tradizionali, settore farmaceutico, materiali innovativi, biotecnologie, settore alimentare. Lo studio del sistema ambiente è uno degli ambiti nei quale la Chimica Analitica, di recente, ha apportato contributi tecnico-scientifico di particolare rilevanza. Ciò ha contribuito a fornire una più approfondita conoscenza dell'ambiente ai fini di un suo controllo e per una corretta prevenzione di qualsiasi forma di degrado.</p> <p>Il curriculum di Chimica Analitica ed Ambientale dovrebbe prevedere 4 possibili percorsi formativi:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1) Scienza delle Separazioni: teoria di base, modelli teorici, nuovi metodi di separazione.</li><li>2) Chimica Analitica dell'Ambiente: studio della chimica ambientale, chimica analitica strumentale avanzata;</li><li>3) Chemiometria: modellizzazione e caratterizzazione di sistemi chimici complessi.</li><li>4) Metodologie Chimico-Analitiche Innovative: analisi di materiali e alimenti; miscele enantiomeriche; validazione di metodi.</li></ol>

2	<p><b>Chimica Fisica, Strutturale e Computazionale</b></p> <p>Fattori fortemente unificanti fra i diversi percorsi proposti sono da identificare nell'ottima educazione di base impartita, nell'opportunità per gli studenti di affrontare tematiche chimico-fisiche avanzate di grande rilevanza scientifica e tecnologica. Questo curriculum prevede quattro percorsi formativi.</p> <p><i>Interazione e riconoscimento molecolare.</i> Studio delle interazioni molecolari di non-legame come base delle moderne tecnologie di progettazione "mirata" di nuovi materiali. Studio di dispositivi e sensori molecolari e di nuovi farmaci selettivamente "riconosciuti" da macromolecole biologiche.</p> <p><i>Termodinamica dei sistemi biologici.</i> Studio dell'equilibrio di associazione fra biomolecole trasmettentrici di segnale e biorecettori citoplasmatici e di membrana per la sintesi mirata di nuove molecole bioattive.</p> <p><i>Elettrochimica ed elettrocatalisi.</i> Vengono investigati sia i meccanismi di reazioni elettrochimiche classiche a più stadi che la reattività elettrochimica di substrati organici nei confronti della demolizione ossidativa.</p> <p><i>Chimica fisica computazionale, spettroscopica e teorica.</i> Studio delle interazioni intra ed intermolecolari che governano sia la reattività chimica che la formazione degli stati condensati. Produzione (oltre che utilizzazione) di software scientifico adatto alla modellizzazione di tali interazioni.</p>
3	<p><b>Fotochimica e Fotocatalisi</b></p> <p>La Fotochimica è al centro di molti fenomeni naturali di importanza vitale per l'umanità, basti pensare alla fotosintesi, alla visione, ai processi che determinano la composizione di atmosfera e troposfera. E', d'altra parte, alla base di processi artificiali di grande rilevanza pratica ed è coinvolta nello sviluppo di campi di grande interesse futuro, quali l'elettronica molecolare e le nanotecnologie.</p> <p>I gruppi che collaborano a questo Curriculum hanno una lunga esperienza nei rispettivi settori della Fotochimica, che ricoprono parecchi campi di interesse scientifico e applicativo. Le tematiche di ricerca coltivate nell'ambito del Curriculum sono marcatamente interdisciplinari, con uno spettro che spazia dalla sintesi chimica, ai materiali funzionali, alle tecniche di caratterizzazione sia spettroscopiche che elettrochimiche e alle cinetiche veloci e ultra-veloci.</p> <p>Nell'ambito del Curriculum, si possono identificare i seguenti percorsi formativi: (i) fotochimica supramolecolare e fotosintesi artificiale; (ii) materiali funzionali per "information storage"; (iii) fotochimica di materiali polimerici; (iv) fotocatalisi per processi puliti e per la degradazione di inquinanti.</p>

4	<p><b>Sintesi e Reattività Organica</b></p> <p>La chimica organica costituisce una parte propedeutica e fondamentale delle scienze chimiche. La sintesi organica moderna rappresenta, invece, un settore specifico della chimica organica orientata alla produzione di composti naturali e loro analoghi dotati di specifiche proprietà biologiche (nuovi farmaci), di nuovi composti polimerici dotati di proprietà meccaniche superiori di quelli naturali (nuovi materiali), di composti iperfunzionalizzati ed autoaggreganti (sistemi supramolecolari). Per raggiungere i suddetti obiettivi, la sintesi organica si sviluppa verso la ricerca di reazioni veloci, stereoselettive, ed efficienti, e che impiegano nuovi reagenti e catalizzatori poco inquinanti. E' da sottolineare che la esecuzione della sintesi comporta anche l'apprendimento di metodi strumentali di purificazione e caratterizzazione di composti organici, fra cui primeggiano varie tecniche cromatografiche (HPLC, GC) e spettroscopiche (NMR, IR). Inoltre, nei casi in cui vengano affrontati problemi sintetici di composti biologicamente attivi, si ha interazione con settori biochimici e farmaceutici. Nei casi invece in cui si affrontano tematiche di sintesi di materiali polimerici, si ha una ovvia interazione con i vari aspetti della scienza delle macromolecole.</p> <p>Nell'ambito del Curriculum si prevedono tre percorsi formativi:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Metodologie di sintesi di composti biologicamente attivi.</li> <li>2. Metodologie di sintesi con reagenti supportati su polimeri.</li> </ol> <p>Metodologie di sintesi di sistemi polimerici contenenti recettori molecolari.</p>
5	<p><b>Sintesi e Reattività Inorganica</b></p> <p>L'attività di ricerca del gruppo di Chimica Inorganica e Metallorganica ha riguardato il settore della sintesi e reattività di nuovi composti inorganici e metallorganici. L'esistenza di cognizioni fondamentali di Chimica Inorganica e Metallorganica ha permesso di sviluppare in generale nuovi e potenti metodi sintetici di importanti classi di composti di interesse in chimica fine. In particolare la sintesi di nuovi composti metallorganici rappresenta la chimica di frontiera nel settore della catalisi omogenea, sia per l'attivazione di substrati organici sia per la sintesi di nuove poliolefine. Facendo seguito a ricerche precedentemente svolte nel campo della sintesi inorganica e metallorganica i gruppi di ricerca che collaborano a questo curriculum hanno messo a punto la sintesi di una serie nuovi composti non solo di potenziale utilizzazione in campo catalitico, ma anche idonei in campo farmacologico come potenziali radiodiagnostici e chemioterapici.</p> <p>Tali settori di ricerca, collocandosi in aree squisitamente interdisciplinari, (Chimica Inorganica - Organometallica, Catalisi; Chimica Inorganica - Chimica Bioinorganica, farmaci radiodiagnostici e chemioterapici), offrono la possibilità di percorsi formativi ad ampio spettro in campi tecnologicamente avanzati.</p> <p>I percorsi formativi possono pertanto così configurarsi:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Design e sintesi di composti inorganici e metallorganici di potenziale utilizzazione in catalisi omogenea adatti alla sintesi enantioselettiva.</li> <li>2) Design e sintesi di complessi inorganici come potenziali radiodiagnostici e chemioterapici.</li> </ol>

## FIGURA PROFESSIONALE DI ALTA QUALIFICAZIONE CHE IL DOTTORATO INTENDE FORMARE

Le potenzialità didattiche di questa struttura di ricerca sono rilevanti, in particolare per produrre personale di elevata qualificazione professionale e di elevata, autonoma capacità di progettazione e di conduzione della ricerca scientifica in campi tecnologicamente avanzati. Questo appare di grande importanza in Italia dove, a causa di una profonda ristrutturazione universitaria sempre in itinere, si sente fortemente la mancanza di laureati di elevata formazione che possano costituire il naturale ricambio dell'attuale classe dirigente aziendale da un lato e del presente corpo accademico dall'altro. Fine precipuo del Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche è, pertanto, quello di contribuire a formare, attraverso i propri dottorati, tale personale di alta qualificazione e che, al contempo, sia inserito in un più vasto ambiente di ricerca attraverso la pianificata partecipazione a scuole, convegni e workshops nazionali ed internazionali e lo svolgimento di appositi stages in ambiente sia accademico che aziendale, soprattutto all'estero.