



Consiglio Nazionale delle Ricerche

PIANO ANNUALE 2006

Preliminare

Progettazione Molecolare

Elenco dei Progetti:

Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)

Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto

Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche

Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche

Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce

Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery



**Progettazione molecolare di proprietà
biochimiche (aspetti farmacologici, biologici
e genetici)**



Sintesi e caratterizzazione mediante metodologie chimiche innovative, di scaffold molecolari per l'individuazione di nuove molecole biologicamente attive.

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MAURO PANUNZIO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Amadelli Rossano	I	D'Anna Maria Gioia	VI	Mordini Alessandro	II
Bandini Elisa	V	Damiani Stefania	VII	Panunzio Mauro	I
Battaglia Arturo	II	Donzellini Simonetta	IV	Polo Eleonora	III
Biagiotti Francesco	VII	Fusco Caterina	III	Rafaschieri Angela	VII
Bonaccini Marusca	IV	Ghirardelli Maurizio	VIII	Reginato Gianna	II
Bragaglia Giovanni	V	Guerrini Andrea	V	Roda Silvana	IV
Cardellicchio Cosimo	III	Lughi Daniela	VI	Seconi Giancarlo	I
Chiodini Roberta	VIII	Martelli Giorgio	II	Varchi Greta	III

Tem

Tematiche di ricerca

Metodologie sintetiche eco-compatibili. Nuove tecniche non convenzionali (es. microonde) eco-compatibili. Sintesi di composti biologicamente attivi attraverso elaborazione /funzionalizzazione di molecole di origine naturale.. Verranno proseguiti gli studi su molecole con attivita' anticancro, come i taxani, o i derivati della camptotecina. Studio di reazioni selettive per la creazione di piattaforme molecolari a potenziale attivita' biologica. Sviluppo di metodologie basate sull'uso di reazio

Stato dell'arte

La ricerca internazionale nel campo della chimica organica ha come obbiettivi la messa a punto di processi industriali eco-compatibili e la sintesi di nuovi prodotti e nuovi processi a basso costo e ad elevato valore aggiunto. Nel campo delle sostanze biologicamente attive, oggetto del nostro interesse scientifico, molte risorse vengono destinate alla sintesi di farmaci anticancro, di farmaci per il sistema nervoso centrale e di antibiotici e antivirali. E in quest'ambito che si inserisce la no

Azioni

Attività da svolgere

Sviluppo di nuove metodologie sintetiche ecocompatibili. Sintesi di piccoli peptidi a potenziale attivita' anticancro. Sintesi di derivati tassatici. Studio di reazioni di Diels-Alder e Staudinger per la preparazione di piccoli eterocicli, scaffold di prodotti ciclici ed aciclici a potenziale attivita' biologica.

Punti critici e azioni da svolgere

Nonostante il gruppo sia ben presente sullo scenario scientifico internazionale, come dimostra la produzione scientifica, esiste una oggettiva difficoltà di disporre di una massa critica di mesi/uomo per competere con gruppi di ricerca a risonanza internazionale. Scarse risorse economiche di origine pubblica per aggiornare il parco strumentazione.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Collaborazioni (partner e committenti)

SKB- Verona, Indena-Milano, Farchemia-Treviglio

Finalità

Obiettivi

Sintesi di nuovi scaffold, intermedi per la preparazione di composti ad attivita' biologica. Nuovi processi ecocompatibili per l'ottenimento degli stessi.



Risultati attesi nell'anno

1 anno: Produzione di nuove librerie di composti a potenziale attività biologica da sottoporre a screening farmacologici. Sintesi di derivati tassatici sostituiti da un ammino gruppo in posizione 14. Sintesi di derivati b-lattamici da utilizzare come inibitori enzimatici

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo: Sintesi e caratterizzazione mediante metodologie chimiche innovative, di scaffold molecolari per l'individuazione di nuove molecole biologicamente attive.

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Sintesi e caratterizzazione mediante metodologie chimiche innovative, di scaffold molecolari per l'individuazione di nuove molecole biologicamente attive.

Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
391	273	62	0	1226	189	524	262	N.D.	1677

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
11	16

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
3	2	1	0	0	0	0	1	2	9

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
3	4	4	11

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Biocatalizzatori

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica del riconoscimento molecolare
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	SERGIO RIVA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Botti Paola Anna	III	Morrone Raffaele	III	Riva Sergio	II
Carrea Giacomo	I	Nicolosi Giovanni	I	Sanfilippo Claudia	III
Cussigh Gabriella	V	Ottolina Gianluca	III	Secundo Francesco	III
Freri Domenicangelo	VI	Pagnotta Eduardo	V	Serra Stefano	III
Giordano Assunta	III	Panzeri Walter	V	Trincone Antonio	III
Lambusta Daniela	III	Pasta Piero	III	Varinelli Donatella	VI
Monti Daniela	III	Pedrocchi Fantoni Giuseppe Andrea	III	Zambianchi Francesca	III

Temi

Tematiche di ricerca

L'attività di ricerca che viene svolta in questa commessa a carattere fortemente interdisciplinare riguarda le tematiche tipicamente collegate allo sviluppo e all'utilizzo sintetico di un catalizzatore, specificamente - in questo caso - di origine biologica. Come dettagliato ed esemplificato in seguito, vengono affrontati aspetti relativi alla produzione, isolamento, caratterizzazione di nuovi enzimi e, in prospettiva, al loro clonaggio ed espressione in opportuni microrganismi produttori; all'ottimizzazione del biocatalizzatore e delle condizioni di reazione, in soluzioni acquose ed in solventi organici ("medium engineering"); all'utilizzo di enzimi isolati o di cellule per la preparazione per la modifica selettiva di composti naturali complessi e per la preparazione di sintoni con elevato eccesso enantiomerico, precursori di principi attivi, aromi, fragranze e aminoacidi non naturali.

Stato dell'arte

Con il termine 'biocatalisi' si intende lo sfruttamento delle peculiarità degli enzimi o microrganismi per la soluzione di problemi nei settori della chimica fine e farmaceutica, dell'agrochimica ed in campo alimentare e ambientale. La biocatalisi è una componente essenziale della biotecnologia 'white' industriale ritenuta dalla Commissione Europea, dal CEFIC e dalla Biotech Industries Association una componente fondamentale per lo sviluppo in Europa di una chimica sostenibile. All'estero le attività che coinvolgono la biocatalisi sono intensissime sia a livello industriale che accademico. Sempre più industrie utilizzano biocatalizzatori, per rispondere alla forte esigenza di nuovi processi produttivi che siano efficienti, economici, eco-compatibili ed a basso consumo energetico. Analogamente, numerosi ricercatori degli Enti di Ricerca e delle Università stanno intensamente operando per ampliare lo spettro dei biocatalizzatori disponibili e per migliorarne le proprietà. Anche in Italia numerosi scienziati del CNR e delle Università sono coinvolti in una vivace attività di ricerca interdisciplinare, dei cui risultati si è giovata e verosimilmente ancor più si gioverà in

Azioni

Attività da svolgere

Questa commessa riguarda principalmente lo studio e l'utilizzo di enzimi appartenenti a due delle sei classi in cui vengono classificati gli enzimi: le OSSIDORIDUTTASI e le IDROLASI. Lo specifico delle ricerche da svolgere è dettagliato nelle schede relative ai due Moduli che compongono la commessa. L'attività, necessariamente di carattere interdisciplinare, riguarderà aspetti relativi all'isolamento, alla caratterizzazione e al clonaggio di nuovi enzimi, all'ottimizzazione delle condizioni di reazione in acqua e in solventi organici, all'utilizzo di enzimi isolati o di cellule per la preparazione di sintoni chirali, la modifica selettiva di composti naturali complessi, l'ottenimento di composti olfattivamente attivi (aromi e fragranze) con elevata purezza enantiomerica. Di alcune trasformazioni particolarmente significative verranno approfondite le problematiche connesse con lo sviluppo ad una scala di produzione industriale.



Punti critici e azioni da svolgere

Si ritiene che gli obiettivi proposti nei due Moduli siano realistici tenendo conto delle competenze esistenti e del numero di ricercatori impegnati. Un punto critico è legato alla strumentazione di laboratorio, in alcuni casi ormai obsoleta, che necessiterebbe di miglioramento sia come upgrading che come sostituzione o nuove acquisizioni (ad esempio spettrometro di massa MALDI-TOF, HPLC, spettrofotometri UV-VS). A questo si potrebbe fare fronte con un finanziamento straordinario vincolato all'acquisizione di nuova strumentazione. Un altro punto critico è legato all'inserimento di nuovo personale sia a tempo indeterminato (ricercatore con competenze di biologia molecolare, collaboratore tecnico per la corretta manutenzione e gestione degli apparecchi) che a tempo determinato (assegni di ricerca post-dottorato e borse di sostegno per dottorandi).

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

I ricercatori coinvolti in questa commessa (afferenti all'Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare e all'Istituto di Chimica Biomolecolare del CNR) occupano una posizione preminente in campo nazionale ed internazionale nel settore della biocatalisi e hanno le competenze necessarie per lo sviluppo di una attività altamente interdisciplinare, possedendo le conoscenze (e strumentazioni) di chimica organica, modellistica molecolare, tecnologia di processo, biotecnologia, enzimologia e microbiologia che sono necessarie per sviluppare processi biocatalitici di interesse applicativo-industriale.

Collaborazioni (partner e committenti)

Collaborazioni nazionali sono in corso con ricercatori delle Università di Milano, Milano Bicocca, Messina, Modena, e del Politecnico di Milano. Inoltre questa commessa è inserita in un network di collaborazioni internazionali ufficializzate dal CNR o dal Ministero degli Esteri con istituzioni Austriache (BOKU Universität, Vienna), Ceca (Istituto di Microbiologia, Accademia delle Scienze, Praga), Portoghese (Università di Coimbra) e SudAfricane (Università di Cape Town), e dalla Comunità Europea (CNRS Marsiglia, Università di Vienna, Università di Oviedo, Università di Groningen, Network of Excellence MARBEF, Azione COST D-25). Una parte delle ricerche in itinere sono state commissionate dalle Ditta Indena S.p.A., Prodotti Chimici Alimentari S.p.A., Intercos S.p.A., DiPharma S.p.A., e vengono svolte in collaborazione con loro ricercatori. Alcune ricerche, finanziate dalla Regione Lombardia (FSE) e dal MIUR (FIRB), sono svolte in collaborazione con ricercatori delle Università di Milano, Milano Bicocca e Piemonte Orientale (sede di Novara) e con l'ISTM del CNR (sezione di Milano). Infine un'altra collaborazione è in corso con ricercatori dell'IMM del CNR.

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale che intendiamo perseguire è lo sviluppo di nuovi processi, basati sull'impiego di biocatalizzatori, per la sintesi di molecole biologicamente attive, di interesse per l'industria chimica, farmaceutica, alimentare, manifatturiera e cosmetica. Si studieranno reazioni biocatalizzate che siano efficienti, eco-compatibili ed economicamente vantaggiose. L'attività di ricerca, esplicitata nelle rispettive schede di attività dei due MODULI che la costituiscono, è mirata al raggiungimento dei seguenti obiettivi specifici: a) Isolamento, caratterizzazione e ottimizzazione delle prestazioni di nuovi biocatalizzatori b) Utilizzo di trasformazioni biocatalizzate nella sintesi di composti ad attività biologica c) Scaling-up delle reazioni biocatalizzate

Risultati attesi nell'anno

I seguenti risultati sono attesi nel 2006: a) Ossidoriduttasi: Ossido-riduzioni regio e stereoselettive catalizzate da idrossisteroidedeidrogenasi. Caratterizzazione biochimica e studio della specificità di substrato di varie flavinomonossigenasi. Utilizzo di laccasi e tirosinasi per l'ossidazione di fenoli, ammine, glicosidi naturali, oligo- e polisaccaridi. b) Idrolasi: Individuazione e caratterizzazione di nuove idrolasi, da fonti microbiche o da organismi marini, e ottimizzazione delle loro prestazioni anche in soluzioni non acquose. Utilizzo sintetico di idrolasi per la modifica selettiva di composti naturali e per la risoluzione cinetica di racemati, anche di molecole con chiralità assiale, precursori di aminoacidi non naturali, di aromi e fragranze con scheletro nor-terpenoideo, di intermedi di principi attivi farmaceutici. Sintesi biocatalizzata di poliesteri. c) Scaling-up delle reazioni biocatalizzate. Sviluppo a livello dimostrativo, su scala da multi-grammi a multi-chilogrammi, di almeno un processo per ognuna delle due classi di enzimi considerate. Sviluppo di tecniche per separare, su larga scala, i prodotti delle biotrasformazioni.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

I risultati ottenuti nell'ambito della commessa "Biocatalizzatori" potranno avere significative ricadute applicative in diversi campi: a) Nella chimica fine, farmaceutica ed agrochimica, portando allo sviluppo ulteriore di processi più blandi, efficienti, selettivi ed a più basso consumo energetico per la preparazione di intermedi e prodotti di elevatissima purezza chimica ed enantiomerica. Il tutto con un minor



numerodi passaggi sintetici e senza o con ridotto utilizzo di reattivi ecatalizzatori chimici inquinanti.b)Nel settore alimentare contribuendo alla preparazione, modifica eupgrading di aromi naturali e fragranze, amminoacidi, fosfolipidi, additivi ed alimenti funzionali. c)In campo ambientale, riducendo l'inquinamento mediante lo sviluppo diprocessi industriali più puliti.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

E' ragionevole prevedere un impatto positivo nella formazione di giovanilaureati e tecnici esperti nei settori delle bioconversioni e dellebiotecnologie chimiche, campi di attività normalmente poco trattati nelperiodo di formazione scolastica e universitaria. La presente commessa, basata sul contributo integrato e sinergico diRicericatori del CNR, delle Università e di alcune Industrie committenti,dovrebbe portare a risultati di cui potrà beneficiare sia la comunitàscientifica nazionale ed internazionale che le industrie italiane attiveni settori della chimica fine e farmaceutica ed in campo alimentare.

Moduli

Modulo: Caratterizzazione ed utilizzo di enzimi idrolitici
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Applicazioni sintetiche della biocatalisi
Istituto esecutore: Istituto di chimica del riconoscimento molecolare
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
698	141	147	107	1093	129	417	115	N.D.	1337

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
11	15

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	2	2	5	0	0	0	0	6	15

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
3	6	4	13

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - TARGETING MOLECOLARE

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di biostrutture e bioimmagini
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MICHELE SAVIANO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Amendola Maurizio	VI	Ferrari Bravo Valentina	VII	Pedone Emilia Maria	III
Barone Luana	VII	Gargiulo Antonietta	VIII	Perretta Giuseppe	VI
Berisio Rita	III	Grasso Giulia	III	Piccolo Giosue'	VII
Bucci Enrico	III	Improta Roberto	III	Ruvo Menotti	II
Campagna Tiziana	VI	La Mendola Diego	III	Santoro Anna Maria	III
D'Ambrosio Katia	III	Lauceri Rosaria	III	Saviano Michele	II
D'Andrea Luca Domenico	III	Luongo Delia	III	Sorrentino Giosue'	VI
Dathan Nina Alayne	III	Monti Simona Maria	III	Tabbi Giovanni	III
De Simone Giuseppina	III	Occorsio Paola	VI	Vitagliano Luigi	II
De Vita Gabriella	VI	Palumbo Rosanna	III	Zaccaro Laura	III
Di Gaetano Sonia	III	Pappalardo Giuseppe	III	Zona Leopoldo	VI
Esposito Luciana	III				

Temi

Tematiche di ricerca

Le tematiche di ricerca in cui si inserisce questa commessa sono quelle legate allo studio di fenomeni di riconoscimento molecolare in sistemi complessi, per lo sviluppo su basi molecolari di nuovi sistemi in grado di modulare funzioni biologiche con specifiche proprietà di delivery. In particolare, le tre tematiche trattate sono: a) studio di Complessi proteina/proteina e proteina/oligonucleotidi; b) sistemi sintetici riconoscibili da target biologici; c) ingegnerizzazione di oligonucleotidi per scopo di delivery e in applicazioni decoy e antisense. E' da sottolineare che queste tematiche, il targeting e la veicolazione di candidati farmaci, costituiscono un campo di ricerca di grosso interesse per le industrie, sempre alla ricerca di nuovi lead compound e di composti sempre più selettivi, specifici e attivi.

Stato dell'arte

Questa commessa si inserisce nel filone di ricerca dello studio di processi di riconoscimento molecolare in sistemi complessi del tipo proteina-proteina, peptide-proteina, oligonucleotidi-proteina, nonché di sistemi sintetici biomimetici con proteine e oligonucleotidi. Nell'era post-genomica, la possibilità di accedere ad un numero pressochè illimitato di informazioni sulla organizzazione del genoma e dei geni, spinge ad accumulare sempre maggiori conoscenze sui prodotti dei geni e su come essi sono funzionalmente organizzati. Infatti, la formazione di complessi macromolecolari in cui diverse proteine, con funzioni diverse, regolano una funzione biologica è un cardine della moderna ricerca scientifica. La comprensione a livello atomico delle relazioni attività-struttura costituisce la base per la definizione e caratterizzazione di nuovi target molecolari in differenti patologie. Inoltre, questi studi costituiscono la base per lo sviluppo su basi molecolari di nuovi sistemi in grado di modulare funzioni biologiche con specifiche proprietà di delivery.

Azioni

Attività da svolgere

Le attività che si intendono svolgere in quest'anno, su diversi sistemi legati a patologie tumorali e al targeting a specifiche strutture cellulari, sono le seguenti: a) caratterizzazione strutturale delle classi di composti sviluppate come modulatori dell'angiogenesi, per la verifica dei dati di progetto; b) "test" in vivo delle classi di composti sviluppate come modulatori dell'angiogenesi per la verifica del loro uso in applicazioni terapeutiche e diagnostiche; c) screening in vitro di sequenze peptidiche e/o peptidomimetiche derivate dalla proteina AKAP121, per la verifica delle capacità di legare il mitocondrio; d) design, sintesi e test funzionali di sistemi sintetici in grado di interferire con le funzioni di domini di tipo Death; e) caratterizzazione e studi biochimici della prima classe di composti sviluppata per la rimozione del colesterolo; f) sviluppo di una prima classe di composti utilizzabili per combattere processi di stress ossidativi; g) sviluppo di molecole



oligonucleotidiche modificate, per ottenere molecole con buone proprietà di trasporto ed elevata stabilità alla degradazione enzimatica e in grado di modulare funzioni geniche.

Punti critici e azioni da svolgere

Tutti i progetti descritti risultano al momento fattibili per le competenze ed infrastrutture al momento disponibili. Inoltre la multidisciplinarietà dei progetti garantisce anche la possibilità di sinergie utili allo sviluppo di prodotti nell'ambito della farmaceutica e della diagnostica. Per quanto riguarda i punti di criticità, essi riguardano essenzialmente i flussi di risorse finanziarie e la possibilità di disporre di personale ricercatore per svolgere le attività descritte.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Per il raggiungimento degli obiettivi si propone un approccio multidisciplinare che prevede l'integrazione di competenze trasversali quali: a) progettazione e sintesi di peptidi e peptidomimetici, b) sviluppo di metodologie bioinformatiche, c) caratterizzazione allo stato solido e in soluzione, d) tecniche di spettrometria di massa, e) tecniche di espressione e purificazioni di proteine, f) tecniche di calcolo parallelo e di dinamica molecolare. In particolare, le attività da svolgere prevedono una fase di progettazione e sintesi di nuove molecole utilizzando dati di letteratura e dati forniti nell'ambito di collaborazioni scientifiche da esperimenti in vivo e in vitro. Quindi prevedono delle prove di funzione biologica in vitro e una parallela caratterizzazione in soluzione e allo stato solido delle nuove molecole. Le molecole che presentano attività biologica (molecole di prima generazione) sono oggetto di modifiche per poter migliorare la loro biodisponibilità. A questo punto i nuovi composti ad alta attività, selettività ed affinità sono pronti per poter essere forniti a gruppi clinici per le prove tossicologiche e per prove cliniche.

Collaborazioni (partner e committenti)

Le attività da svolgere nell'ambito dei diversi progetti sono in collaborazione con differenti partners sia industriali (Sigma Tau, sud Tecnogen etc) sia pubblici (IEOS CNR, diversi Dipartimenti dell'Università di Napoli Federico II, CIRPEB, Dipartimento di Biochimica e Biologia Molecolare Università di Ferrara, etc). I committenti per questa commessa sono, non solo committenti a livello istituzionale (Regione Campania, Comunità Europea, MIUR) ma anche committenti industriali (tecnogen, Sigma tau, ...)

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale della Commessa è lo sviluppo di nuove molecole a diversa complessità come farmaci o come mezzi di contrasto e traccianti ad alta specificità, che coniughino un'elevata selettività verso il target molecolare con una bassa tossicità legata al ridotto dosaggio. Gli obiettivi specifici della commessa sono: a) ottenimento di sistemi sintetici per la veicolazione di farmaci a particolari compartimenti cellulari; b) studio di domini proteici di tipo Death per determinare le basi molecolari di processi infiammatori consentendo di ottimizzare l'attività di eventuali farmaci inibitori; c) sviluppo di nuove molecole in grado di inibire l'interazione di fattori coinvolti nell'angiogenesi tumorale; d) progettazione e sintesi di glicoconiugati di piccole molecole, potenzialmente utilizzabili per combattere processi di stress ossidativi; e) progettazione di molecole oligonucleotidiche costituite da blocchi di diversa natura chimica legati covalentemente, per ottenere molecole con buone proprietà di trasporto ed elevata stabilità alla degradazione enzimatica e in grado di modulare funzioni geniche.

Risultati attesi nell'anno

I risultati scientifici attesi sono i seguenti: a) ottenimento di molecole, specifiche e selettive verso target recettoriali overespressi in tumori, da utilizzare sia come mezzi di contrasto in tecniche di diagnostiche per imaging radiotraccianti in medicina nucleare, che come agenti terapeutici radiomarcanti a bassa tossicità legata ad un ridotto dosaggio; b) ottenimento delle molecole di prima generazione già ottenute per il trattamento di malattie dipendenti da un difettivo trasporto inverso del colesterolo; c) incremento del know-how nelle nuove tecniche di riconoscimento e delivery di molecole; d) ottenimento di molecole di prima generazione per l'inibizione dei processi di dimerizzazione in Death Domain implicati in patologie tumorali; e) ottenimento di nuove sequenze di PNA e PNA-peptidi antisense, per modulare lo splicing del pre-mRNA del gene della b-globina, e correggere fenomeni di splicing aberrante. Le nuove molecole identificate come lead compound saranno brevettate e/o oggetto di pubblicazione su riviste scientifiche internazionali. Infine si prevede di presentare i risultati più significative a congressi nazionali e internazionali.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Le molecole identificate come potenziali farmaci o diagnostici, dopo un positivo screening in modelli animali, saranno coperti da brevetto internazionale. Questi brevetti possono essere di potenziale interesse per le industrie farmaceutiche e biotecnologiche del settore. In ogni caso non si prevede nel breve e medio termine, un impiego di detti prodotti per processi produttivi.



- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Le molecole sviluppate in questa commessa sono nuovi 'lead compound' con potenziali applicazioni in diagnostica e farmaceutica molecolari per la prevenzione e la cura di patologie ad alto impatto sociale.

Moduli

Modulo: Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - TARGETING MOLECOLARE

Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
358	63	669	0	1090	120	852	94	N.D.	1304

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
6	10

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
3	2	3	5	0	0	0	2	1	16

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	5	1	7

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Basi molecolari nelle patologie correlate al disordine conformazionale proteico.

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di biostrutture e bioimmagini
Sede principale svolgimento:	Sezione di Catania
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIUSEPPE PAPPALARDO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Attanasio Francesco	III	Lauceri Rosaria	III	Ruvo Menotti	II
Berisio Rita	III	Luongo Delia	III	Sanna Daniele	III
Campagna Tiziana	VI	Magri Antonio	III	Santoro Anna Maria	III
De Vita Gabriella	VI	Milardi Danilo	III	Saviano Michele	II
Esposito Luciana	III	Monti Simona Maria	III	Tabbì Giovanni	III
Grasso Giulia	III	Pappalardo Giuseppe	III	Vitagliano Luigi	II
Improta Roberto	III	Pluchino Carlo	VII	Zito Valeria Maria Vincenza	VI
La Mendola Diego	III				

Temi

Tematiche di ricerca

Negli ultimi anni è stato dimostrato che l'insorgere di molte malattie può essere correlato ad alterazioni nella conformazione di specifiche proteine. Tale fenomeno può determinare direttamente la malattia, come nel caso delle malattie da prioni o nel morbo di Alzheimer, oppure contribuire al peggioramento del quadro clinico come nel caso dell'amilina che appare essere coinvolta nel diabete di tipo 2. La presente proposta di ricerca si inserisce principalmente nel contesto delle Neuroscienze e si propone di indagare sugli aspetti molecolari associati con il 'mis-folding' di proteine responsabili di malattie neurodegenerative e di individuare peculiari fenomeni patologici indotti da ioni metallici. La conoscenza dettagliata dei fenomeni associati ad ogni stadio molecolare caratterizzante il processo di 'mis-folding' proteico è un ulteriore obiettivo da perseguire per la realizzazione di nuovi agenti terapeutici mirati al trattamento specifico di queste patologie.

Stato dell'arte

La comunità scientifica è sempre più impegnata nella ricerca di nuovi strumenti terapeutici volti a contrastare i fenomeni molecolari che stanno alla base di molte patologie riconducibili a disordini della conformazione di proteine (PCD). La complessa etiopatologia che caratterizza questo tipo di condizioni patologiche richiede anche un approccio scientifico innovativo prevalentemente rivolto alla comprensione delle interazioni molecolari esistenti fra i vari distretti cellulari e le proteine responsabili delle malattie, nonché dell'influenza di tale "microambiente" sulla loro stabilità conformazionale ed invecchiamento. Se da una parte, esistono documentate conoscenze relativamente agli aspetti genetici e clinici di molte malattie associate con le PCD, dall'altra poco si conosce, a livello molecolare, circa le caratteristiche strutturali delle specie chimiche coinvolte nei primi eventi del processo di alterazione conformazionale e come queste entità molecolari si relazionano con il distretto biologico in cui si ritrovano.

Azioni

Attività da svolgere

Si continuerà nella sintesi e caratterizzazione strutturale di frammenti peptidici derivati da proteine fibrillogeniche e loro interazione con ioni metallici. In particolare ci si propone di studiare i meccanismi che guidano i processi di folding/misfolding e dell'aggregazione dell'amilina e altre proteine amiloidi come il prione, l'amiloido beta, beta-2-microglobulina. L'attenzione sarà anche indirizzata alla progettazione e sintesi di nuovi peptidi/peptidomimetici e loro bioconiugati capaci di antagonizzare gli effetti patologici di proteine strutturalmente alterate o di ridurre il processo di amiloidogenesi utili per il trattamento delle malattie neurodegenerative o delle amiloidosi in genere. In questo contesto saranno condotti esperimenti in presenza di ioni metallici e di molecole con proprietà beta-sheet breaker. Saranno infine condotti esperimenti in vitro per valutare il ruolo dello stress ossidativo nei processi di degradazione e aggregazione delle proteine.



Punti critici e azioni da svolgere

La multidisciplinarietà che caratterizza l'attività di ricerca è garantita dal sinergismo sia con i gruppi afferenti all'IBB-CT sia dalle collaborazioni con altri "teams" con competenze utili allo sviluppo delle tematiche di ricerca. Fra punti di criticità si deve sottolineare l'inadeguatezza delle risorse finanziarie assegnate per lo svolgimento delle attività a fronte di un continuo impegno da parte del personale nel reperire con successo risorse aggiuntive. A ciò si deve aggiungere anche la totale mancanza di infrastrutture. Ne consegue un disagio che non favorisce una serena progressione delle attività. Inoltre, pur essendo possibile usufruire di sofisticate apparecchiature, allocate presso il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Catania ed alle quali i ricercatori dell'IBB-CT hanno possibilità di accesso, si ritiene necessario sottolineare la necessità di ampliare la propria strumentazione scientifica. Le competenze presenti all'interno dell'IBB-CT sono sensibilmente cresciute negli anni anche a livello internazionale è quindi necessario valorizzare tale risultato attraverso l'assegnazione di posti di ruolo di Dirigente di Ricerca e di Primo Ricercatore.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

La proposta di commessa necessita di un approccio multidisciplinare con competenze sia nel campo chimico, biologico e clinico. L'argomento della presente commessa ha permesso di costituire un gruppo composto da chimici, biologi, farmacologi e medici con il comune obiettivo di studiare un problema di elevata rilevanza scientifica e di grande impatto sociale. Grazie alla natura multidisciplinare del gruppo di ricerca costituito, l'attività di ricerca si avvarrà di metodi di indagini fra i più avanzati e sofisticati. Fra cui tecniche analitiche, di spettrometria di massa, spettroscopiche (fluorescenza, CD, SPR, NMR ed EPR), l'analisi potenziometrica e calorimetrica dei complessi con ioni metallici, misura dell'attività biologica (citotossica e citoprotettiva) in vitro ed in vivo, dei peptidi e dei loro bioconiugati in presenza ed in assenza di ioni metallici. Microscopia confocale per la localizzazione cellulare dei sistemi molecolari indagati.

Collaborazioni (partner e committenti)

Esistono consolidate collaborazioni con Università nazionali ed internazionali nonché con realtà industriali presenti nel territorio. Consorzi interuniversitari: Consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli nei Sistemi Biologici (CIRCMSB)Consorzio Catania Ricerche. Collaborazioni con singoli gruppi di ricerca nelle seguenti Università: Uni. Hospital of the RWTH Aachen, Aachen, (Germania); Aix en Provance, Marsiglia III, (Francia); Debrecen, (Ungheria); Bath, (Gran Bretagna); Leiden, (Olanda); Goeteborg (Svezia); Piemonte Orientale "A. Avogadro" Alessandria; Padova; Catania; Università della Calabria, Arcavacata di Rende (Cs); "Federico II", Napoli; Firenze, Trieste., Bologna; Messina. Collaborazioni con Istituti di Ricerca: Istituto Mario Negri, Milano IRCSS Neuromed di Venafrò (Isernia). Collaborazioni con unità di ricerca di imprese:Forth Dodge Animal Health Division of Whyeth Spa., Catania, Bausch & Lomb, Catania.

Finalità

Obiettivi

Elucidazione dei meccanismi molecolari che conducono all'amiloidogenesi nelle patologie neurodegenerative e da mis-folding proteico. Comprensione dell'influenza dei fattori intrinseci (genetici) e del "microambiente", (inteso come sistemi e compartimenti membranosi cellulari, pH locale, presenza di ioni metallici e stress ossidativo) nella stabilità conformazionale e nell'invecchiamento delle proteine. Identificazione di potenziali punti di intervento per lo sviluppo di una strategia farmacologica mirata. Concomitantamente la profonda conoscenza degli eventi molecolari associati con il processo di aggregazione consente anche l'ottimizzazione di protocolli sperimentali per la diagnosi precoce di queste patologie. Infine, la progettazione e la sintesi di sistemi peptidici e loro bioconiugati, in grado di contrastare l'aggregazione di molecole proteiche è un ulteriore obiettivo che si intende perseguire.

Risultati attesi nell'anno

I risultati attesi dall'attività scientifica possono essere così elencati: i) messa a punto di nuove procedure e metodologie per lo studio chimico-fisico ed analitico di sistemi fibrillogeni in vitro con l'obiettivo di individuare le forze guida coinvolte nelle transizioni conformazionali sia in presenza che in assenza di ioni metallici;ii) sviluppo di nuove metodologie per il design e la sintesi di nuove molecole antifibrillogeniche indispensabili per una strategia farmacologica mirata al trattamento di queste patologie;iii) disponibilità dei protocolli biochimici per la determinazione della citotossicità e per la comprensione dei meccanismi di interazione delle nuove molecole nei sistemi biologici.L'ottenimento di questi risultati passa anche attraverso la disponibilità di nuovi bioconiugati, la speciazione dei complessi metallo-proteine e/o dei loro frammenti peptidici, la determinazione dell'effetto degli ioni metallici sulla conformazione della catena polipeptidica e sulla loro attività fibrillogena, la scelta e la messa a punto di un appropriato modello biologico.



Potenziale impiego

- per processi produttivi

Non si possono prevedere immediate ricadute nell'ambito di processi produttivi. Tuttavia è opportuno sottolineare in questa sede, come alcuni studi condotti nell'ambito delle attività di questa commessa, sono stati considerati propedeutici per applicazioni in settori della chimica dei materiali quali quello dei nanocristalli e delle superfici funzionalizzate con prevedibili ricadute nel campo della biosensoristica.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

L'attività di ricerca in questo settore contribuisce allo sviluppo di nuovi strumenti terapeutici per contrastare vere e proprie malattie sociali che drenano significative risorse economiche alla società. Inoltre sono chiare le potenziali ricadute nell'ambito della diagnostica molecolare e della terapia farmacologica.

Moduli

Modulo: Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Basi molecolari nelle patologie correlate al disordine conformazionale proteico.
Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Basi molecolari nelle patologie correlate al disordine conformazionale proteico.
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Progettazione molecolare di proprietà biochimiche-Basi molecolari nelle patologie correlate al disordine conformazionale proteico
Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
510	89	822	34	1455	146	1057	79	N.D.	1680

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
10	13

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
5	7	0	3	0	0	0	0	2	17

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	4	0	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Sviluppo dei repertori molecolari per applicazioni in diagnostica farmaceutica

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di biostrutture e bioimmagini
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MENOTTI RUVO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Abete Carlo	V	De Vita Gabriella	VI	Pedone Emilia Maria	III
Amendola Maurizio	VI	Di Gaetano Sonia	III	Perretta Giuseppe	VI
Barone Luana	VII	Esposito Luciana	III	Piccolo Giosue'	VII
Berisio Rita	III	Ferrari Bravo Valentina	VII	Raffaelli Andrea	II
Bertozzi Sergio Teclò	II	Gargiulo Antonietta	VIII	Ruvo Menotti	II
Bucci Enrico	III	Improta Roberto	III	Saviano Michele	II
D'Ambrosio Katia	III	Luongo Delia	III	Sorrentino Giosue'	VI
D'Andrea Luca Domenico	III	Monti Simona Maria	III	Vitagliano Luigi	II
Dathan Nina Alayne	III	Occorsio Paola	VI	Zaccaro Laura	III
De Simone Giuseppina	III	Palumbo Rosanna	III	Zona Leopoldo	VI

Temi

Tematiche di ricerca

Le tematiche di questa commessa riguardano la selezione e lo sviluppo di nuove molecole utilizzabili per scopi terapeutici e diagnostici. In particolare sono in studio nuove molecole attive per combattere il diabete di tipo II ed alcuni tumori, oltre a nuove molecole utilizzabili in diagnostica (ICIS) e nuovi metodi di spettrometria di massa per lo studio di profili metabolici e farmacologici (ICCOM). Da studi recenti è emerso che il sistema PED-PLD1 è alla base di alterazioni del trasporto del glucosio mediato da insulina. È stato quindi realizzato un progetto in cui attraverso metodi combinati di preparazione e screening di librerie di composti e di metodi di design razionale si identificano antagonisti selettivi dell'interazione tra le due proteine e si studiano gli effetti in sistemi in vitro e in vivo. Per questo progetto è stato richiesto un finanziamento nell'ambito della legge 297 (febbraio 2004) che è stato approvato ad ottobre 2004. Per i tumori si studia il sistema Cripto-Alk4 selezionando antagonisti recettoriali da impiegare come nuovi farmaci ma anche traccianti per diagnostica. Il modulo ICIS sulle molecole per diagnostica si esaurisce nel 2005.

Stato dell'arte

La preparazione di repertori molecolari, la loro caratterizzazione con metodi di spettrometria di massa e la selezione con tecniche HTS di nuovi composti modulanti l'azione di targets coinvolti in malattie regolando il funzionamento e funzionando da traccianti per la loro localizzazione o per la loro determinazione quantitativa rappresentano uno dei metodi di ricerca ricerca biomedica più attuali ed efficienti per lo sviluppo di nuove molecole di importanza farmaceutica e diagnostica. Tali approcci saranno applicati per la ricerca di antagonisti di PED-PLD1 e per Cripto-Alk4, per i quali ad oggi non sono riportati studi di identificazione di inibitori né nei campi da noi esplorati del diabete né in altri ambiti di studio.

Azioni

Attività da svolgere

Realizzazione di repertori molecolari a base peptidomimetica ed organica per lo screening di nuove molecole ad attività farmacologica per il trattamento del diabete di tipo II (agenti sul sistema PED/PLD1), per la selezione di antagonisti della proteina Cripto e della proteina PIGF per lo sviluppo di antitumorali, diagnostici e traccianti. Caratterizzazione strutturale delle proteine bersaglio inclusa la spettrometria di massa per il design mirato di nuove molecole e librerie 'focused'.

Punti critici e azioni da svolgere

Realizzazione di ulteriori repertori molecolari sintetici e di prodotti naturali; creazione di databases e sviluppo di metodiche, protocolli e softwares dedicati per la gestione dei repertori e la gestione automatizzata dei saggi HTS. Punti critici: acquisizione di ulteriori risorse economiche e di personale tecnico specializzato,



acquisizione di nuova strumentazione dedicata, acquisizione di nuovo spazio dedicato alla preparazione delle librerie, alla conservazione ed allo screening.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze di questa commessa riguardano principalmente il design e la sintesi di nuove molecole bioattive e la loro caratterizzazione strutturale attraverso tecniche di diffrattometria raggi X, di NMR, tecniche spettroscopiche e tecniche di spettrometria di massa. Esistono anche competenze per la caratterizzazione funzionale con tecniche biochimiche, sia classiche (es. ELISA) sia di tipo innovativo come ad esempio BIACORE. Esistono inoltre competenze per l'espressione e la purificazione di proteine in vari sistemi ospiti. Sono in corso di acquisizione competenze per la realizzazione di saggi di screening di repertori molecolari con tecniche ad alta efficienza (HTS). Esistono competenze di MRI.

Collaborazioni (partner e committenti)

Istituto per l'Endocrinologia e l'Oncologia (IEOS) del CNR di Napoli, Istituto di Genetica e Biofisica (IGB) del CNR di Napoli, Università Federico II di Napoli, Società Tecnogen, Società Sigma-Tau, Università di Salerno.

Finalità

Obiettivi

Obiettivi: Identificazione di nuove molecole ad azione antidiabetica, antitumorale e studio dei meccanismi molecolari associati ai targets studiati. Sviluppo di nuovi traccianti per scopi diagnostici. Messa a punto di metodi di spettrometria di massa per studi di profili metabolici e farmacologici. Comprensione di meccanismi molecolari alla base delle patologie studiate.

Risultati attesi nell'anno

Realizzazione di alcuni repertori molecolari e dei databases per la loro gestione. Acquisizione di macchine per sintesi chimica parallela e combinatoriale, acquisizione di macchine per saggi di screening HTS, messa a punto di saggi per lo screening di repertori molecolari, acquisizione di know-how e training sulle tecniche specifiche di HTS.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Le molecole identificate saranno eventualmente coperte da brevetto internazionale in caso di risultati soddisfacenti nella fase di sperimentazione animale. In ogni caso non si prevede un impiego per processi produttivi, almeno nel breve-medio termine.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

I risultati di questo progetto potranno essere impiegati per lo sviluppo di nuovi principi attivi per la lotta contro importanti patologie di forte impatto sociale ed economico quali alcune forme di diabete e di tumore.

Moduli

Modulo: Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Sviluppo dei repertori molecolari per applicazioni in diagnostica farmaceutica
Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Sviluppo dei repertori molecolari per applicazioni in diagnostica farmaceutica
Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
499	68	217	0	784	12	297	152	N.D.	948

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
8	11

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
6	3	0	3	0	1	0	0	5	18

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	6	1	9

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Progettazione su base strutturale di molecole di rilevanza terapeutica

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di biostrutture e bioimmagini
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	LUIGI VITAGLIANO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Amendola Maurizio	VI	Di Gaetano Sonia	III	Pedone Emilia Maria	III
Barone Luana	VII	Esposito Luciana	III	Perretta Giuseppe	VI
Berisio Rita	III	Ferrari Bravo Valentina	VII	Piccolo Giosue'	VII
Bucci Enrico	III	Gargiulo Antonietta	VIII	Ruvo Menotti	II
D'Ambrosio Katia	III	Improta Roberto	III	Saviano Michele	II
D'Andrea Luca Domenico	III	Luongo Delia	III	Sorrentino Giosue'	VI
Dathan Nina Alayne	III	Monti Simona Maria	III	Vitagliano Luigi	II
De Simone Giuseppina	III	Occorsio Paola	VI	Zaccaro Laura	III
De Vita Gabriella	VI	Palumbo Rosanna	III	Zona Leopoldo	VI

Temi

Tematiche di ricerca

Nell'ambito della presente commessa si utilizzerà l'approccio della progettazione molecolare su base strutturale per ottenere nuovi composti che possano essere impiegati nel trattamento di gravi patologie umane. In particolare, ci si propone di progettare e caratterizzare molecole con attività antibiotica, antitumorale e antiobesità. A tal fine, sono previste caratterizzazioni strutturali e funzionali di sistemi proteici e nucleo-proteici di molecole di interesse terapeutico.

Stato dell'arte

La progettazione su base strutturale di biomolecole dotate di efficacia terapeutica rappresenta un campo di notevole interesse farmaceutico. I notevoli costi connessi al processo di individuazione di nuovi farmaci ha indotto le industrie farmaceutiche a ricorrere a strutture esterne per la fase di progettazione molecolare. Esiste quindi una forte domanda di ricerca di base ed applicata, in parte soddisfatta dalle piccole Biotech, che da alcuni anni investe anche il mondo della ricerca pubblica.

Azioni

Attività da svolgere

Le attività programmate per l'anno 2006 seguiranno le differenti direttrici che, alla luce dei risultati ottenuti nel corso del 2005, si sono rivelate particolarmente promettenti. Una specifica attenzione sarà rivolta alla caratterizzazione strutturale di diversi sistemi macromolecolari quali (a) proteine e complessi nucleo-proteici (ribosoma) che giocano un ruolo essenziale nel processo di biosintesi proteica, (b) anidridi carboniche, che sono target per la terapia di numerose patologie, (c) proteine coinvolte in disordini metabolici, (d) proteine con attività antitumorale, (e) proteine isolate da patogeni come il *Mycobacterium tuberculosis* e l'*Helicobacter pylori*, e (f) di proteine strutturali coinvolte in gravi patologie. Queste attività saranno affiancate da ricerche volte alla progettazione ed alla caratterizzazione di nuove entità molecolari di potenziale interesse terapeutico. Particolare riguardo sarà rivolto alla caratterizzazione di composti con attività agonista per il fattore di crescita nervosa NGF. La disponibilità di nuova strumentazione, che è in fase di acquisizione, rappresenterà un importante supporto alle attività programmate.

Punti critici e azioni da svolgere

Per il raggiungimento degli obiettivi saranno impiegate competenze nei campi della biologia molecolare, della chimica e della biologia strutturale, della chimica computazionale e della biologia cellulare. L'acquisizione di nuove apparecchiature, utilizzando risorse finanziarie reperite nel 2005 e risorse attese per il 2006, nel campo della diffrazione dei raggi X e della risonanza magnetica nucleare rappresenta una solida base per lo sviluppo delle attività programmate. Gli aspetti critici dello sviluppo dei progetti riguardano principalmente i flussi finanziari e la possibilità di disporre di nuove unità di personale.



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Nelle sue linee generali la progettazione su base strutturale di molecole di interesse farmaceutico prevede tre stadi fondamentali: (a) l'acquisizione di informazioni strutturali sui sistemi di interesse, (b) la progettazione e la caratterizzazione di molecole in grado di modulare opportunamente l'attività dei sistemi bersaglio ed, infine, (c) la verifica sperimentale dell'efficacia delle molecole progettate. Per il raggiungimento di questi obiettivi saranno messe a frutto competenze nei campi della biologia molecolare, della chimica e della biologia strutturale, della chimica computazionale e della biologia cellulare.

Collaborazioni (partner e committenti)

Le attività di ricerca saranno sviluppate in stretta collaborazione con numerose istituzioni scientifiche nazionali ed internazionali (North Dakota State University, (USA), Tampere University (Finlandia), Max Plank Institute (Germania), EMBL Amburgo (Germania) e Weizmann Institute (Israele), CNRS Strasburgo (Francia), e Nancy University (Francia)). In alcune delle tematiche di ricerca sono coinvolti partner industriali (PRIMM, Pfizer, INBIOS, e Tecnogen)

Finalità

Obiettivi

Obiettivo principale di questa commessa è progettare molecole di interesse terapeutico utilizzando informazioni derivanti dalla caratterizzazione strutturale dei sistemi bersaglio. Per ciascun sistema considerato ci si propone di ottenere preliminarmente informazioni strutturali dettagliate. Sulla base di questi risultati si procederà alla progettazione ed alla caratterizzazione di nuovi composti.

Risultati attesi nell'anno

Nel corso del 2006 ci prefigge di ottenere risultati sia nella caratterizzazione di strutture di macromolecole biologiche e loro complessi con inibitori e/o analoghi di substrato, che nella progettazione di nuove molecole che siano in grado di modularne l'attività. In particolare, ci si prefigge di ottenere dettagliate informazioni strutturali su numerosi sistemi molecolari di diversa complessità strutturale. Una parte sostanziale delle attività sarà dedicata alla progettazione molecolare a partire dai risultati ottenuti nel campo della caratterizzazione strutturale. Per alcuni progetti, come quelli relativi alla formulazione di agonisti del fattore di crescita nervoso NGF, saranno effettuati anche test di funzionalità in vitro ed in vivo sulle molecole progettate e sintetizzate.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Le attività di ricerca previste nella presente commessa rientrano in quella che viene genericamente definite fase di discovery di nuove molecole di interesse terapeutico. Pertanto, sono prevedibili potenziali ricadute dei risultati conseguiti in processi produttivi di farmaci solo a medio e a lungo termine.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Lo sviluppo di nuovi farmaci è essenziale non solo per migliorare l'efficacia del trattamento di patologie la cui cura è ancora insoddisfacente ma anche, visti i problemi connessi ai fenomeni di resistenza, per ottimizzare progressivamente composti che al momento mostrano una buona efficacia terapeutica.

Moduli

Modulo: Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Progettazione su base strutturale di molecole di rilevanza terapeutica

Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
311	174	64	0	549	4	242	91	N.D.	644

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo *</i>	
ricercatori	Totale
5	8

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
8	5	3	4	0	0	0	0	1	21

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	5	0	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Targeting e inibizione dell'angiogenesi

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica del riconoscimento molecolare
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MATTEO ZANDA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Auzzas Luciana	III	Dalocchio Roberto Nico	V	Rassu Gloria Maria Rita	II
Azara Emanuela Gigliola	VI	Fenude Emma	II	Sechi Davide Giovanni	VI
Colombo Giorgio	III	Giglio Maria	VI	Costantino	
Culeddu Nicola	III	Rassu Francesco	VI	Viani Fiorenza	III
				Zanda Matteo	II

Temi

Tematiche di ricerca

L'angiogenesi è un fenomeno che nell'adulto è legato esclusivamente all'insorgenza di situazioni patologiche, ad esempio tumori solidi. L'inibizione e il targeting dell'angiogenesi, sfruttando dei marker proteici selettivi che vengono over-espressi in condizioni di angiogenesi, rappresentano delle strategie di grande e crescente importanza in terapia e diagnosi delle malattie connesse.

Stato dell'arte

Sono già noti diversi markers proteici validati che vengono over-espressi in condizioni di angiogenesi, che includono la trombospondina, il VEGF, il PIGF, integrine, il PF-4, l'ED-B, alcune metalloproteasi di matrice (MMP). Sono disponibili sul mercato, o in fase clinica avanzata, diverse molecole e anticorpi che agiscono secondo i meccanismi di targeting ed inibizione dell'angiogenesi, soprattutto nella diagnosi e terapia del cancro.

Azioni

Attività da svolgere

Modulo (WP) 1 (ICB): Sintesi stereoselettiva di collezioni di piccole molecole organiche naturali e naturali-analoghe mirate a sottotipi recettoriali delle integrine. Modulo (WP) 2 (ICRM): Targeting dell'angiogenesi via inibizione di Metalloproteinasi di Matrice (MMP) e binding al dominio ED-B della fibronectina. I moduli di ISTM ed IBB sono in chiusura nel 2006.

Punti critici e azioni da svolgere

I punti più critici riguarderanno l'individuazione e l'ottimizzazione di molecole con alta affinità verso i recettori target.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le principali competenze sono nel campo della sintesi chimica di strutture organiche complesse, in modo anche stereoselettivo, con tecniche di sintesi combinatoria e parallela. Competenze anche nell'indagine strutturale con metodi spettroscopici (NMR, etc.). Competenze in fase di acquisizione nel campo di test biologici in vitro (inibizione enzimatica) e culture cellulari.

Collaborazioni (partner e committenti)

Collaborazioni: ICB: (1) Università degli Studi di Parma ' Fac. Farmacia Dip. Farmaceutico; (2) Università Studi Sassari ' Fac. Scienze Matematiche Fisiche Naturali, Dip. Chimica; (3) Sigma-Tau ' Pomezia IBB: (2) Ist. Genetica e Biofisica (IGB) del CNR, Napoli; (2) Thromb-X NV (TX), Leuven, Belgio. ICRM: (1) ETH Zurich, Dep. Applied Biosciences (Prof. Dario Neri); (2) Ist. Farmacologico Mario Negri Bergamo (Dr. Raffaella Giavazzi). Committenti: Commissione Europea.



Finalità

Obiettivi

Design, sintesi e valutazione biologica di molecole per il targeting e l'inibizione dell'angiogenesi, sfruttando i markers PIGF, integrine (alfaVbeta3 e alfaVbeta5), ED-B e MMP. Individuazione di tecniche di sintesi, anche combinatorie, innovative e mirate di nuove entità molecolari per il targeting e l'inibizione dell'angiogenesi.

Risultati attesi nell'anno

Individuazione di alcune molecole attive a livello almeno micromolare verso i recettori target. Identificazione e messa a punto di metodologie sintetiche efficaci e mirate per le molecole target.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Sintesi organica, sintesi combinatoria, tecnologia farmaceutica.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Individuazione di nuove molecole bioattive, potenzialmente farmaci, per la diagnosi e la terapia di gravi patologie ad elevata diffusione (ad es. cancro).

Moduli

Modulo: Targeting e inibizione dell'angiogenesi per mezzo di antagonisti del recettore Flt-1 di VEGF/PIGF

Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Sassari

Modulo: Sintesi stereoselettiva di collezioni di piccole molecole organiche naturali e naturali-analoghe mirate a sottotipi recettoriali delle integrine

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Sassari

Modulo: Targeting e inibizione dell'angiogenesi per la terapia anti-cancro

Istituto esecutore: Istituto di chimica del riconoscimento molecolare

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Sassari

Modulo: Sintesi di inibitori delle integrine per applicazioni di tipo terapeutico e diagnostico

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Sassari

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
276	22	83	0	381	175	280	29	N.D.	585

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
5	5

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
2	0	0	4	0	0	0	2	0	8



<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
4	6	0	10

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sostanze bioattive da fonti naturali

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	AGATA GAMBACORTA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Aiello Antonella	V	Gambacorta Agata	I	Romano Ida	VI
Buonomo Antonio	VIII	Giordano Assunta	III	Salzano Loredana	V
Calandrelli Valeria	V	Lama Licia	III	Salzano Pasqualina	VII
Cimino Guido	I	Lopez Aniello	VI	Strazzullo Giuseppe	III
De Giulio Alfonso	III	Matto Daniela	VII	Trincone Antonio	III
De Prisco Rocco	II	Nicolaus Barbara	II	Turco Raffaele	V
Di Pinto Corrado	IV	Pagnotta Eduardo	V	Zambardino Umberto	V
Esposito Enrico	V	Poli Annarita	III	Zampa Maurizio	V

Temi

Tematiche di ricerca

La presente commessa di ricerca ha lo scopo di ottenere nuove molecole biologicamente attive e di studiarne le interazioni con i sistemi biologici, attraverso lo studio di fonti naturali di prodotti chimici come gli organismi marini, i batteri estremofili, i funghi e le piante. La ricerca di nuovi metaboliti porterà all'individuazione di farmaci ed agrofarmaci innovativi di origine naturale e natural-like

Stato dell'arte

L'ottenimento mediante tecniche a basso impatto ambientale di sostanze da fonti naturali e la loro trasformazione in prodotti ad alto valore aggiunto è ricerca di grande interesse e di grande attualità. Nel contesto scientifico attuale si stanno sviluppando in tutto il mondo importanti programmi scientifici che hanno come obiettivo la ricerca di nuovi potenziali farmaci da fonti marine, da estremofili e da scarti dell'industria agro-alimentare.

Azioni

Attività da svolgere

Continueranno gli studi per mettere a punto metodi microbiologici tesi all'isolamento di estremofili utili per applicazioni in biotecnologia. Continueranno gli studi su enzimi idrolitici di interesse applicativo come proteasi e amilasi. Inoltre si studieranno ceppi modelli per l'ottenimento di eso-ed endopolimeri di uso applicativo ed infine inizieranno i campionamenti per l'isolamento di ceppi microbici produttori di idrogeno. Continueranno gli studi sugli scarti della lavorazione del pomodoro sia per l'ottenimento di prodotti innovativi sia per il potere antiossidante e proprietà farmacologiche. Inizieranno gli studi sulle piante della foresta amazzonica come fonti di prodotti bioattivi.

Punti critici e azioni da svolgere

La cronica mancanza di giovani ricercatori, dottorandi, borsisti, etc. rende difficile il completo svolgimento delle ricerche. Analogamente la mancanza di fondi sufficienti. L'attività di ricerca è di natura sperimentale e i costi dei reagenti, solventi, terreni di cultura etc. sono molto alti.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Chimica organica, biochimica ed enzimologia. Estrazione, purificazione ed identificazione di sostanze naturali sia marine che vegetali. Isolamento e caratterizzazione di microorganismi e utilizzo di parti di essi o di loro molecole bioattive (polisaccaridi, enzimi, polialcanoati) nelle biotecnologie. Indagine e studio di metabolismi di macro- e micro-organismi. HPLC, NMR, MASSA, 16SRNA, tecniche cromatografiche e microbiologiche. Saggi di attività biologica.

Collaborazioni (partner e committenti)

UNI.Me; UNI-Delhi, Uni-CT; ENEA-Roma; Perù; Gran Bretagna; Valencia-Spagna; UNI-VR; Provincia di Salerno; Regione Campania; CNR-IBP; UNINA SUN; UNINA Federico II; Shanghai Institute of Materia



Medica (SIMM); Chinese Academy of Sciences, Shanghai; National Institute of Engineering and Industrial Technology (INETI), Lisbona - Portugal; University of Queensland, Brisbane (Australia); Pacific Institute of Bioorganic Chemistry, Russian Academy of Sciences (RAS), Vladivostok (Russia); University of Athens, Grecia; Centro de Estudios Avanzados de Blanes (CEAB)- Consejo Superior de Investigaciones Científica - Spagna; National Institute of Oceanography, CSIR, Goa (India); Moldova Academy of Sciences, Chisinau (Moldova); ANICAV Associazione Nazionale Industrie Conserviere Vegetali; ICTP-CNR.

Finalità

Obiettivi

Nuovi composti da organismi marini e loro applicazione. Semisintesi di sostanze con più alto valore applicativo. Maricoltura per ottenimento di sostanze bio-attive. Utilizzo degli estremofili per la produzione di biomolecole a basso ed alto peso molecolare. Messa a punto di metodiche per preservare le sostanze bioattive negli alimenti. Individuazione e manipolazione di processi metabolici per l'ottenimento di prodotti a basso peso molecolare

Risultati attesi nell'anno

-Isolamento e caratterizzazione di nuove attività enzimatiche -Caratterizzazione di polimeri e fisiologia di produzione-Messa in cultura di nuovi ceppi produttori di biomolecole (idrogeno, polimeri ed enzimi, etc.)- Pomodoro come fonti di antiossidanti e loro attività farmacologia-Molecole bioattive da vegetali della foresta amazzonica

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Industria farmaceutica, chimica fine e agroalimentare; biotrasformazioni; microorganismi; organismi marini; scarti industriali.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

I risultati della presente ricerca potranno permettere l'ottenimento di nuovi farmaci e molecole biotecnologiche da risorse poco esplorate e poco applicate come i macro- e microorganismi marini, microorganismi non convenzionali come gli estremofili, le diatomee, i cianobatteri, ecc. Scarti di lavorazioni industriali, utilizzando tecniche che permettano di ottenere prodotti ad alto valore aggiunto a basso impatto ambientale.

Moduli

Modulo: Biomasse microbiche
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Biomasse vegetali
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
648	208	42	196	1094	168	418	205	N.D.	1467

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
6	14

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	1	1	0	0	0	0	0	2



<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	4	4	8

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Studi molecolari e valorizzazione di risorse per il settore biomedico

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sezione di Catania (Valverde)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIOVANNI NICOLOSI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Biondi Daniela Maria	III	Geraci Corrada	III	Righi Giuliana	III
Bovicelli Paolo	II	Lambusta Daniela	III	Rocco Concetta	V
Cali Cristina	III	Mecca Tommaso	III	Ruberto Giuseppe	II
Consoli Grazia Maria Letizia	III	Morrone Raffaele	III	Sanfilippo Claudia	III
Cristaldi Salvatore	IX	Nicolosi Giovanni	I	Spampinato Daria	III
Cunsolo Francesca	III	Patti Angela	II		
Foti Mario Concetto	III	Pedotti Sonia	III		
		Renda Agatino	VI		

Tem

Tematiche di ricerca

La tematica entro cui si intende operare concerne l'isolamento e/o la sintesi di molecole bioattive. Per un verso si individuano nei sistemi biologici vegetali (piante officinali) molecole o metaboloma che possono trovare applicazione in fitoterapia. Per un altro verso si progettano sintesi per preparare molecole atte a interagire con i sistemi biologici a scopo terapeutico. La sintesi organica selettiva viene applicata per realizzare molecole altamente funzionalizzate e specializzate sia nel riconoscimento molecolare dinamico sia verso azioni di affinità recettoriale. Alcune azioni specifiche dell'attività della commessa a) Individuazione di metaboliti ad attività antinfiammatoria per uso fitoterapico. b) Isolamento e affinità molecolare di glicerofosforil inositoli e loro modifiche strutturali. c) Preparazione di quercetine ad attività inibitoria verso HSP coinvolte nel neuroblastoma infantile. d) Sviluppo di derivati calixarenici come recettori abiotici per il riconoscimento dell'eparina. e) Sintesi di glicoconiugati ad attività immunostimolante. f) Preparazione di molecole chirali in forma enantiopura per la farmaceutica e la diagnostica.

Stato dell'arte

Isolare e definire la struttura chimica di principi attivi ottenuti da piante permette di meglio garantire requisiti di sicurezza nel settore della fitoterapia. Un crescente interesse esiste per nuovi principi naturali bioattivi. Nell'ambito biomedico è dimostrato che i glicerofosforilinositoli hanno ruolo base nella riproduzione cellulare, pertanto esiste forte interesse per individuare nuovi inositoli che possano funzionare da agenti antitumorali. La disponibilità di dispositivi sicuri per il controllo dell'eparina nel trattamento ematico è tuttora modesto. In questo settore abbiamo sintetizzato e brevettato una serie di molecole che potrebbero funzionare da selettori di eparina. Studi recenti hanno dimostrato una azione immunostimolante potenziata in glicomulticoniugati legati con più unità antigene. Pertanto è di interesse individuare nuovi scaffold da utilizzare in questa strategia per avere accesso a nuovi farmaci immunostimolanti.

Azioni

Attività da svolgere

a) Individuazione di metaboliti ad attività antinfiammatoria per uso fitoterapico. b) Isolamento e affinità molecolare di glicerofosforil inositoli e loro modifiche strutturali. c) Preparazione di quercetine ad attività inibitoria verso HSP coinvolte nel neuroblastoma infantile. d) Sviluppo di derivati calixarenici come recettori abiotici per il riconoscimento dell'eparina. e) Preparazione di molecole chirali in forma enantiopura per la farmaceutica e la diagnostica. f) Sintesi di glicoconiugati ad attività immunostimolante.

Punti critici e azioni da svolgere

a) Determinazione strutturale per dei metaboliti 'minor' che presentano proprietà biologica (attività antinfiammatoria). Il ricorso a progettazione di sintesi avanzata sarà necessaria al fine di disporre di quantità sufficiente di questi metaboliti. b) Controllo stereochimico degli step sintetici atti a preparare glicerofosforil



myo-inositolo. Sarà necessario un impiego combinato di procedure biocatalitiche coadiuvate da procedure di sintesi asimmetrica. In generale è necessario sviluppare nuove competenze in organocatalisi asimmetrica.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi organica. metodologie e tecnologie di purificazione cromatografica. Metodologie spettroscopiche.

Collaborazioni (partner e committenti)

Agroindustry Advanced Technologies SpA; Consorzio MarioNegri Sud; Regione Siciliana - Assessorato Agricoltura e Foreste 'Divulgazione Piante officinali'; MIUR attraverso il Programma Operativo Nazionale; National Research Council of Canada; Università di Catania, Facoltà di Farmacia; Istituto CNR di Chimica e Tecnologia dei Polimeri; Università di Messina, Dipartimento Farmaco-biologico; COST Framework project number D25/0002/02. Istituto CNR per la Microelettronica e Microsistemi. Università di Torino. Ospedale Infantile Regina Margherita, Torino

Finalità

Obiettivi

Sviluppo di nuove molecole naturali di interesse fitoterapico. Sviluppo di nuovi inositoli di interesse biomedico. Sviluppo di nuove molecole di interesse nella cura del neuroblastoma infantile. Sviluppo di un dispositivo per il controllo dell'eparina in dialisi. Creazione di vaccini sintetici.

Risultati attesi nell'anno

I seguenti risultati sono attesi nel 2006:a) Definizione del metaboloma di almeno una pianta officinale.b) Sviluppo di una sintesi per la preparazione di glicerosforilinositolo 4-O-fosfato con purezza >98%.c) Sviluppo di una sintesi per la preparazione in microscala di glicerosforilinositolo recante funzione CHOH in 4-C.d) Sintesi di calixareni-derivati ancorati su matrice capaci di sequestrare eparina.e) Preparazione di almeno un macrociclo funzionalizzato con antigene Tn.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Farmaci; Prodotti fitoterapici; Fine Chemicals; Dispositivi medicali.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Impiego nel settore biomedico per la realizzazione di farmaci naturali. Sfruttamento nel settore biomedico per realizzare supporti altamente selettivi e per produrre farmaci ad elevata purezza.

Moduli

Modulo:	Studi molecolari e valorizzazione di risorse per il settore biomedico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Catania (Valverde)
Modulo:	Definizione di metaboloma di piante a scopo applicativo
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Catania (Valverde)
Modulo:	Isolamento e affinità molecolare di glicerosforil inositoli e loro modifiche strutturali
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Catania (Valverde)
Modulo:	Sviluppo di derivati calixarenici come recettori abiotici per il riconoscimento dell'eparina
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Catania (Valverde)
Modulo:	Sintesi di glicoconiugati ad attività immunostimolante
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Catania (Valverde)
Modulo:	Preparazione di farmaci chirali in forma enantiopura
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Catania (Valverde)



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
696	345	431	216	1688	129	905	155	N.D.	1972

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
12	15

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	3	6	0	0	0	8	0	17

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	2	0	2

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sintesi di piccole molecole per patologie inabilitanti

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sezione di Roma
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	PAOLO BOVICELLI

Elenco dei partecipanti

Antonioletti Roberto	liv. III	De Mico Antonella	liv. III	Giordano Cesare Giovanni	liv. III
Bovicelli Paolo	II	Fedeli Angela	VII	Lambusta Daniela	III
Caruso Francesco	III	Foti Mario Concetto	III	Righi Giuliana	III
D'Onofrio Franco	III				

Temi

Tematiche di ricerca

Sintesi di nuovi farmaci per malattie da stress ossidativi (polifenoli, flavonoidi e derivati maggiormente biodisponibili), sintesi di nuovi farmaci per malattie neurodegenerative (inibitori di secretasi, induttori di caspasi, bet-sheet-breakers), inibitori di proteasi per la terapia di patologie specifiche (inibitori di proteasi, inibitori di caspasi, peptidomimetici)

Stato dell'arte

know-how: - metodologie per la sintesi di polifenoli - tecniche chemio-enzimatiche per la esterificazione selettiva di flavonoidi - tecniche di sintesi di peptidi chemotattici e amiloidogenici - metodi di apertura diastereoselettiva di piccoli cicli e sintesi di amminopolialcoli e amminoacidi non naturali per peptidomimetici - Inibitori di MMP-2 e MMP-9 già allo studio per le attività inibitorie di metallo proteasi di matrice, già preparati, alcuni dei quali brevettati

Azioni

Attività da svolgere

Sintesi di idrossitirosolo da materiali di scarto, derivati ossigenati dell'alcol omovanillico, flavoni alogenati ed alchilati, composti peptidici e non peptidici ad attività inibitoria di caspasi e secretasi, sul modello di molecole già note per la loro attività biologica, pseudopeptidi destabilizzanti l'aggregazione di beta-amiloidi, resistenti al metabolismo, derivati del saquinavir, inibitore dell'HIV proteasi, preparazione di inibitori di metallo proteasi di matrice altamente selettivi

Punti critici e azioni da svolgere

Finalizzazione delle attività in corso alle tematiche della commessa, compresa l'effettuazione di test biologici preliminari su modelli già sintetizzati per orientare le attività future. Studio di fattibilità ed inizio delle attività nuove previste. Punto critico principale per lo svolgimento delle attività è oltre le risorse finanziarie e di personale, l'ammodernamento improrogabile delle apparecchiature strettamente necessarie (spettrometro NMR, GC-MS).

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Collaborazioni (partner e committenti)

Dipartimento di Chimica Università 'La Sapienza' di Roma Dipartimento di Tecnologie Farmaceutiche Università 'La Sapienza' di Roma Istituto di Genomica e Biologia Integrativa dell'Università di Delhi (India) Vassar College, Dipartimento di Chimica, Poughkeepsie, NY USA Università di Trieste, Dipartimento di Farmacologia



Finalità

Obiettivi

Sintesi di molecole con l'attività biologica prevista dalla commessa. Test biologici delle molecole preparate, da effettuarsi presso i laboratori delle istituzioni coinvolte nel progetto. Produzione in scala preparativa delle molecole più interessanti. Eventuale spin-off con prodotti commercializzabili.

Risultati attesi nell'anno

Flavonoidi liposolubili ad attività antiossidante e test della loro attività, anche come antiproliferativi ed induttori di caspasi. Peptidomimetici come inibitori dell'aggregazione di beta-amiloidei. Studio di modelling di piccole molecole come inibitori di caspasi ed inizio dei lavori per la sintesi di modelli.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo: Sintesi di nuovi farmaci per malattie da stress ossidativi
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Roma

Modulo: Sintesi di nuovi farmaci per malattie neurodegenerative
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Roma

Modulo: Inibitori di proteasi per la terapia di patologie specifiche
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Roma

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
398	100	0	0	498	46	146	30	N.D.	574

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
7	8

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	0	0

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sintesi chimica e diversità molecolare di composti biologicamente attivi

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sezione di Sassari
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MAURO MARCHETTI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Alberico Elisabetta	III	Dettori Maria Antonietta	III	Polinas Antonio Francesco	VI
Azara Emanuela Gigliola	VI	Fabbri Davide Gaetano	III	Rassu Francesco	VI
Culeddu Nicola	III	Fenu Emma	II	Sechi Barbara	VI
Dalocchio Roberto Nico	V	Fina' Clara	VI	Sechi Davide Giovanni	VI
Delogu Giovanna Maria	I	Giglio Maria	VI	Costantino	
Dessi Alessandro	V	Marchetti Mauro	I	Spanu Pietro	III
				Ulgheri Fausta	III

Temi

Tematiche di ricerca

La commessa sarà suddivisa in 4 moduli di attività, le attività saranno sviluppate dal personale afferente e porteranno al raggiungimento degli obiettivi prefissati nell'arco dei prossimi 3 anni. L'attività sarà basata sulla sintesi di piccole molecole organiche anche naturali e naturali analoghe sottoforma di singolo composto o di collezioni. La sintesi sarà applicata anche a sistemi multifunzionali complessi e porterà alla preparazione di composti biologicamente attivi e di loro intermedi.

Stato dell'arte

In tutti i più recenti documenti, volti all'identificazione di linee guida strategiche di sviluppo tramite la ricerca e l'innovazione a livello internazionale per il raggiungimento di obiettivi scientifici a medio-lungo termine, nei settori di maggior impatto sulla moderna società, si rileva come il passaggio dalle tradizionali tecnologie alle nuove a maggiore efficienza (enabling technologies) richieda una progettazione mirata e sempre più specifica delle componenti a base molecolare. Al momento attuale lo scenario internazionale della ricerca sulla preparazione delle molecole biologicamente attive è in rapida evoluzione, in particolare la ricerca riguardante l'attività terapeutica. E' ancora difficile prevedere gli sbocchi di questa rivoluzione in termini di nuove acquisizioni conoscitive e di strategie per lo sviluppo di biomolecole. Quello che ci si aspetta è l'efficienza la ricerca e lo sviluppo di principi attivi. Certamente la ricerca sfrutterà al meglio l'evoluzione della chimica molecolare, ma i suoi successi saranno sempre più basati sulla conoscenza della variabilità delle dinamiche funzionali dell'organismo biologico bersaglio.

Azioni

Attività da svolgere

L'attività da svolgere sarà caratterizzata dalla sintesi di nuovi composti biologicamente attivi attraverso l'utilizzo di tecniche avanzate altamente selettive e sarà articolata in 4 diversi moduli di attività, tutti indirizzati alla preparazione di strutture molecolari innovative ad attività biologica. La presente commessa si inserisce nel nuovo campo della biologia chimica e si propone con una serie di tecnologie abilitanti, patrimonio dei ricercatori afferenti, di sviluppare nuove molecole attive sia nel settore dei tumori sia in quello delle malattie neurovegetative; saranno inoltre sviluppati composti bioattivi per sistemi agrobiologici. L'esperienza dei partecipanti alla commessa nel settore della progettazione, sintesi e caratterizzazione dei composti organici è garanzia di successo dal punto di vista chimico, l'interazione e la collaborazione con gruppi di ricerca biomedici permetterà di conoscere la reale attività dei prodotti sintetizzati.

Punti critici e azioni da svolgere

I punti critici della commessa sono i finanziamenti e le collaborazioni con gruppi di ricerca biomedici sia per avere input su esigenze attuali di molecole sia per l'effettuazione delle prove di attività. Occorre intensificare i rapporti con il mondo industriale, questo deve essere avviato da un coordinamento a livello nazionale, che potrebbe essere un organo del futuro Dipartimento, in grado di effettuare una costante ricognizione volta a reperire sul mercato industriale i finanziamenti necessari e affidato nella sua continuità al capo commessa.



Per quanto riguarda le collaborazioni con gruppi di ricerca e/o industriali in grado di effettuare le necessarie prove biologiche sui composti sintetizzati occorre attivare un coordinamento sopradipartimentale che permetta l'interazione efficace multidisciplinare indispensabile per un avanzamento concettualmente moderno delle conoscenze. Infine si dovrebbero stilare accordi specifici con industrie del settore per portare allo stadio di sviluppo precompetitivo i prodotti derivanti dalla ricerca.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze principali presenti sono: sintesi chimica stereoselettiva, catalisi, chimica bioorganica, biomimetica, produzione di librerie di composti bioattivi, analisi strutturale di composti bioattivi, peptidi, peptidomimetici, carboidrati, glicomimetici, analisi delle interazioni recettore-ligando, risonanza magnetica, raggi X, spettroscopia di massa, modellistica molecolare. Le nuove competenze da acquisire sono quelle destinate alla realizzazione delle prove di attività delle nuove molecole, le acquisizioni possono avvenire con l'instaurazione di nuove collaborazioni esterne con gruppi di ricerca esperti nel settore

Collaborazioni (partner e committenti)

I gruppi di ricerca che fanno parte della commessa hanno in atto una serie di collaborazioni, sia a livello accademico che industriale. Le collaborazioni con le Università sono sviluppate con gli atenei di Milano, Sassari, Cagliari, Roma, Catania, Parma, Pisa e Firenze, mentre le principali collaborazioni industriali sono con le seguenti ditte: BIOPROGRESS, GSK-Verona, ENDURA-Bologna, SIFI-Catania. Inoltre sono in atto numerose collaborazioni internazionali con Francia, Spagna, Brasile e India.

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo principale della commessa è quello di ottenere nuove molecole biologicamente attive e studiarne le interazioni con i sistemi biologici per ampliare le conoscenze nel settore della biologia chimica e giungere infine all'individuazione di nuovi farmaci e/o molecole bioattive. Nel corso di questo lavoro saranno studiate e messe a punto nuove metodologie sintetiche ad alta selettività, per cui rientrano negli obiettivi della commessa la scoperta e l'adattamento di tecniche chimiche avanzate ed innovative alla sintesi di molecole biologicamente attive, così da operare secondo i principi della chimica moderna che prevedono altissime selettività, alte rese e reazioni ecosostenibili.

Risultati attesi nell'anno

Dallo svolgimento del lavoro descritto nella commessa ci si attende per il prossimo anno la preparazione di nuove molecole bioattive e la messa a punto di metodiche sintetiche innovative per la loro sintesi. Questi risultati saranno validati da lavori scientifici e da brevetti, inoltre saranno preparati almeno tre nuovi composti da destinare ad applicazioni industriali secondo gli accordi in corso con la GlaxoSK e con l'Endura S.p.A. con le quali si intende rafforzare la collaborazione. Si intendono aprire nuove collaborazioni, in particolare con gruppi biologici per potenziare il settore dei test dei composti bioattivi sintetizzati.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

I risultati ottenuti potranno essere impiegati in processi industriali (2 brevetti registrati con l'ENDURA S.p.A.), nuovi prodotti forniti alla GlaxoSK. Inoltre una serie di nuovi composti bioattivi sintetizzati devono essere testati per il loro potenziale impiego come principi attivi. Qualora risultassero attivi è necessario provvedere alla loro brevettazione e allo sviluppo precompetitivo in collaborazione con imprese del settore.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Molti dei risultati ottenuti dal lavoro di ricerca svolto nell'ambito della commessa saranno utilizzati per la diffusione e l'incremento delle conoscenze nel settore della preparazione delle molecole biologicamente attive e saranno validati e messi a disposizione della collettività attraverso pubblicazioni scientifiche e comunicazioni a congresso. Queste novità scientifiche potranno rispondere ad esigenze culturali nel settore della chimica e della biologia chimica, campi di notevole interesse evolutivo per lo studio delle interazioni delle piccole molecole con i nuovi biopolimeri svelati dalla proteomica.

Moduli

Modulo:	Design, Sintesi e Valutazione Biologica di Nuovi Potenziali Inibitori Peptidomimetici di Caspasi 1
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Sassari



Modulo: Sintesi e caratterizzazione di composti chirali e chirali non racemi di interesse biologico mediante molecole ad alta simmetria
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Sassari

Modulo: Applicazioni catalitiche per la diversità molecolare di composti biologicamente attivi: preparazione di scaffolds per la sintesi di ligandi proteici
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Sassari

Modulo: Ligandi dei recettori nicotinici che modulano neurotrasmettitori (nAChRs)
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Sassari

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
611	221	0	0	832	0	221	225	N.D.	1057

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
8	14

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	2	0	3

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Studi sulle relazioni tra struttura e funzione di biomolecole naturali e sintetiche implicate nelle patologie umane

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	VINCENZO DI MARZO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Aiello Antonella	V	Damiani Stefania	VII	Monti Diego	I
Amodeo Pietro	III	De Luca Ottavio	VIII	Morelli Roberto	IV
Andreotti Giuseppina	III	Di Marzo Vincenzo	II	Motta Andrea	II
Biagiotti Francesco	VII	Di Pinto Corrado	IV	Pagnotta Eduardo	V
Bisogno Tiziana	III	Donzellini Simonetta	IV	Salzano Loredana	V
Bonaccini Marusca	IV	Giordano Assunta	III	Tancredi Teodorico	I
Buonomo Antonio	VIII	Lopez Aniello	VI	Trincone Antonio	III
Castelluccio Emilio Paolo	VI	Machetti Fabrizio	III	Turco Raffaele	V
Chelli Mario	II	Matto Daniela	VII	Zambardino Salvatore	V
Cimino Guido	I	Melck Dominique Juliette	VI		
Colombo Pietro	V	Milone Alfredo	III		
		Mirra Vincenzo	VI		

Temi

Tematiche di ricerca

Studi finalizzati ad applicazioni biomediche su: 1) interazioni proteina- proteina; 2) 'pathways' proteici bersaglio di molecole naturali o sintetiche; 3) meccanismi d'azione della calcitonina; 4) relazioni struttura/attività farmacologica di ammidi bioattive di acidi grassi a lunga catena, 5) nuovi amminoacidi non proteinogenici, peptidi e loro coniugati; 6) meccanismo di azione di derivati dell'artemisinina e di composti perossidici.

Stato dell'arte

Il sequenziamento del genoma consente di conoscere le basi molecolari delle funzioni cellulari. E' ora necessario conoscere la funzione delle proteine codificate dai geni identificati; scoprirne le modificazioni cui vanno incontro durante eventi patologici, la struttura e le modalità di interazione con altre molecole (ligandi, substrati, cofattori, effettori); ed identificare le relazioni tra genotipo, fenotipo e risposta terapeutica per ottenere nuovi farmaci e personalizzarne l'uso.

Azioni

Attività da svolgere

Studi sulle relazioni fra struttura e funzione degli enzimi implicati in processi patologici. Sviluppo di potenziali 'probes' molecolari sia attraverso la sintesi chimica tradizionale e combinatoriale, che sfruttando la biodiversità molecolare delle sostanze naturali. Messa a punto di test di attività farmacologica in vitro, necessari per la comprensione delle relazioni tra struttura delle proteine e la loro capacità di riconoscere ed interagire con piccole molecole e macromolecole.

Punti critici e azioni da svolgere

Scelta delle strategie sperimentali necessarie: 1) a stabilire la partecipazione di proteine e loro ligandi nelle patologie in esame; 2) alla sintesi di 'probes' molecolari e all'analisi delle loro interazioni con le proteine bersaglio. Individuazione delle istituzioni esterne con cui collaborare in esperimenti sul possibile uso terapeutico delle molecole sviluppate, e sulla loro ottimizzazione, negli appropriati modelli.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

- Spettroscopia NMR ad alta risoluzione: tecniche multidimensionali- Calcoli conformazionali da dati NMR- Biologia molecolare- Analisi genetica- Analisi di espressione- Biostatistica e bioinformatica- Biologia cellulare e funzionale- Modeling molecolare- Spettroscopia ottica- Spettrometria di massa- Biochimica delle proteine- Biochimica dei lipidi- Chimica e



biochimica delle sostanze naturali- Clonaggio, espressione e purificazione di proteine ricombinanti-
Saggi di attività farmacologia in vitro (binding, enzimatici, funzionali)- Saggi di attività anti-
proliferativa, pro-apoptotica- Saggi di attività anti-malarica- Tecniche elementari di biochimica
degli acidi nucleici (PCR)- "RNA arrays", proteome profiling, metabolome profiling- Sintesi e
semisintesi organica- Sintesi parallela e combinatoriale- Sintesi su fase solida

Collaborazioni (partner e committenti)

Collaborazioni con altri Istituti del CNR ed Enti pubblici di Ricerca, Università Italiane e Straniere ed industrie farmaceutiche Italiane e Straniere, necessarie per condurre esperimenti atti a stabilire il possibile uso terapeutico delle molecole sviluppate in appropriati modelli animali delle patologie in esame.

Finalità

Obiettivi

Studio genetico/funzionale e delle interazioni proteina/proteina e proteina/ligando, per proteine coinvolte nelle patologie in esame. Ottimizzazione delle molecole al fine di aumentarne l'efficacia, la stabilità e la biodisponibilità. Sviluppo di metodologie da affiancare alle competenze già utilizzate nei seguenti campi: caratterizzazione genomico/funzionale di proteine, sintesi organica, spettrometria di massa, NMR, farmacologia in vitro, modelling molecolare, calcolo e cristallografia.

Risultati attesi nell'anno

Nuovi modelli di calcolo e metodiche di sintesi organica e di analisi mediante NMR e spettrometria di massa. Comprensione di meccanismi alla base della regolazione delle proteine in esame, e loro ruolo nelle patologie in esame. Sintesi e test in vitro di nuovi antitumorali, analgesici, anti-infiammatori, neuroprotettivi, antibiotici, antimalarici.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Proteine, peptidi, endocannabinoidi, calcitonina, artemisina

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Comprensione dei meccanismi molecolari che regolano le interazioni tra nuove proteine di rilevanza patologica e piccole molecole, e loro impiego nel design e sviluppo di nuovi farmaci da utilizzare per il trattamento di patologie disabilitanti umane per le quali non esistono ancora efficaci terapie.

Moduli

Modulo: Studi sulle relazioni tra struttura e funzione di biomolecole naturali e sintetiche implicate nelle patologie umane

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Studi sulle relazioni tra struttura e funzione di biomolecole naturali e sintetiche implicate nelle patologie umane

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Studi sulle relazioni tra struttura e funzione di biomolecole naturali e sintetiche implicate nelle patologie umane

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
792	202	192	151	1337	395	789	212	N.D.	1944

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
9	16

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
3	4	0	1	0	0	0	4	1	13

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	2	2

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Peptidi bioattivi: sintesi e proprietà

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sezione di Padova
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MARCO CRISMA

Elenco dei partecipanti

Agostini Giancarlo	liv. II	Crisma Marco	liv. II	Ruzza Paolo	liv. III
Biondi Barbara	III	Fenude Emma	II		
Calderan Andrea	III	Guiotto Andrea	III		
		Lionello Lucia	VII		

Tem

Tematiche di ricerca

Ricerche finalizzate ad applicazioni biomediche di peptidi. Progettazione, sintesi chimica e/o isolamento da matrici naturali, caratterizzazione chimico-fisica e conformazionale, studi delle relazioni struttura-funzione di peptidi biologicamente attivi e loro analoghi modificati. Le ricerche sono focalizzate su: 1) substrati e inibitori di chinasi e fosfatasi implicate nella proliferazione cellulare; 2) peptidi attivi sulle membrane cellulari con proprietà internalizzanti o antibiotiche; 3) aggregazione proteica in processi neurodegenerativi collegati alla malattia di Parkinson.

Stato dell'arte

In ragione del loro ampio spettro di proprietà biologiche i peptidi bioattivi, naturali o sintetici e loro analoghi mirati caratterizzati da una maggiore efficacia, selettività ed effetti collaterali sempre minori, sono potenzialmente utilizzabili a scopi diagnostici e/o terapeutici in una serie di patologie, quali il cancro, le malattie sensibili agli antibiotici ed antifungini, i disordini neuronali e quelli del sistema immunitario e le malattie cardiovascolari e di origine virale.

Azioni

Attività da svolgere

Sintesi e isolamento da substrati naturali di peptidi bioattivi. Introduzione di restrizioni conformazionali a modifica della loro sequenza naturale. Gli effetti di queste modifiche sulla struttura tridimensionale e sulle proprietà di interazione con bersagli fisiologici sono oggetto di analisi conformazionale in soluzione, mediante NMR, CD, IR, ed allo stato cristallino mediante diffrazione dei raggi X. I saggi di attività enzimatica e farmacologica sono condotti nel quadro delle collaborazioni in atto.

Punti critici e azioni da svolgere

La quantificazione delle spese previste è stata contenuta entro vincoli imposti dall'esterno della Commessa e si colloca ben al di sotto di quanto ritenuto necessario per l'espletamento delle attività. Il conseguimento dei risultati sarà quindi inevitabilmente condizionato dalla effettiva entità delle risorse che saranno messe a disposizione. Si segnala inoltre che nell'ultimo biennio sono venute a mancare:- 2 unità di personale ricercatore;- 2 unità di personale tecnico. Il reintegro delle risorse umane coinvolte nella ricerca risulta quanto meno necessario e urgente. Parimenti necessario appare un rinnovo almeno parziale della strumentazione scientifica. Particolarmente critica risulta infatti la situazione relativa alla strumentazione per la raccolta dei dati di diffrazione dei raggi X da cristallo singolo di piccole molecole che si avvale di uno strumento acquistato nel 1976, la sostituzione del quale appare impossibile in assenza dello stanziamento da parte del CNR di risorse per l'acquisto di grandi apparecchiature.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi chimica, analisi conformazionale, studio struttura-proprietà di peptidi, pseudopeptidi e proteine e dei loro modi di azione in processi biologici. Sono particolarmente sviluppate le competenze riguardanti:- la sintesi chimica di amminoacidi non naturali, peptidi e pseudopeptidi in soluzione o su fase solida;- l'analisi conformazionale di peptidi e proteine in soluzione e in ambienti membrano-mimetici (mediante tecniche avanzate di NMR, dicroismo circolare, spettroscopia FT-IR, fluorescenza dinamica anche indotta da



microonde);- clonazione ed espressione di proteine in sistemi batterici; - cristallografia di peptidi e molecole medio-piccole;- cristallografia di proteine.

Collaborazioni (partner e committenti)

DSM Research, Geleen, The Netherlands; SIRCOB, UMR CNRS 8086, Versailles, France; Leiden Inst. of Chemistry, Leiden Univ., The Netherlands; Inst. of Chemical Kinetics and Combustion, Novosibirsk, Russian Fed.; Dip. di Chimica Biologica, Univ. Padova; Diamond Light Source, Didcot, U.K.; Dip. di Biochimica, Univ. Trieste; Inst. of Biochemistry, Univ. Hospital of the RWTH Aachen, Germany; Dip. Sci. Tecnol. Chim., Univ. Roma "Tor Vergata"; Dip. Scienze Chimiche, Univ. Padova; Dip. di Biologia, Univ. Padova; Harvard Medical School, Boston, USA.

Finalità

Obiettivi

Obiettivi sono la progettazione e la sintesi di sequenze peptidiche, in grado di contrastare infezioni batteriche, malattie degenerative e l'invasione tumorale, con aumentata attività farmacologica e selettività verso i bersagli citati, con maggiore permeabilità alla membrana cellulare, mediante modifiche chimiche e coniugazione con agenti permeabilizzanti, e migliore resistenza alla degradazione enzimatica, attraverso l'incorporazione di building blocks diversi dagli alfa-amminoacidi proteici.

Risultati attesi nell'anno

Sintesi di peptidi inibitori e/o substrati di chinasi e fosfatasi, di coniugati peptide internalizzante-drug e di analoghi di peptidi antibiotici; sviluppo di metodiche spettroscopiche per gli studi delle relazioni struttura-funzione, delle interazioni peptidi-proteina e peptidi-membrana; proprietà conformazionali di amminoacidi non proteici.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Individuazione di peptidi sintetici con potenziali applicazioni per lo sviluppo di farmaci o per la veicolazione endocellulare.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Avanzamento nelle conoscenze relative ai meccanismi molecolari alla base di patologie umane (cancro, infezioni resistenti agli antibiotici di uso corrente, morbo di Parkinson) per le quali non sono disponibili terapie efficaci.

Moduli

Modulo: Peptidi bioattivi: sintesi e proprietà
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Padova

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
322	92	0	0	414	32	124	31	N.D.	477

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo *</i>	
ricercatori	Totale
6	6

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
9	9	4	2	0	0	0	0	0	24



<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	3	0	4

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Identificazione di nuovi biomarcatori diagnostici e nuove molecole ad attività terapeutica nei tumori umani mediante approcci strutturali, funzionali e biomolecolari

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sezione di Sassari
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIUSEPPE PALMIERI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Dalocchio Roberto Nico	V	Manca Antonella	III	Polinas Antonio Francesco	VI
Dessi' Alessandro	V	Palmieri Giuseppe	II	Rassu Francesco	VI
Giglio Maria	VI	Pisano Marina	III	Rozzo Carla Maria	III

Temi

Tematiche di ricerca

a) biologia molecolare, con analisi di genoma, trascrittoma e proteoma; b) biologia cellulare, con allestimento ed analisi di linee cellulari primarie; c) biochimica di proteine e metaboliti; d) farmacologia molecolare; e) NMR di proteine e metaboliti.

Stato dell'arte

Nel periodo 2002-2005: Identificazione di mutazioni predisponenti su geni di suscettibilità per neoplasie- Isolamento di nuovi geni coinvolti nello sviluppo e progressione neoplastica. Sono stati isolati tre nuovi geni: BRAF, mutato nei due-terzi dei casi con melanoma maligno (Nature 417: 949-54, 2002); h-prune, coinvolto nel processo metastatico del carcinoma mammario (Cancer Cell 5: 137-49, 2004); CASC2, associato alla patogenesi del carcinoma endometriale (Hum. Mut. 23: 318-26, 2004)-Analisi di espressione di geni candidati mediante confronto tra tessuti sani e neoplastici-Correlazione dei dati molecolari al sottotipo istologico e stadio clinico-patologico-Definizione delle alterazioni molecolari correlate alla diagnosi e prognosi-Studio conformazionale di proteine ad attività biologica nei tumori-Messa a punto di protocolli di modellazione per omologia e simulazione di trasduttori di segnale-Messa a punto di saggi di crescita e test in vitro di tumorigenicità-Messa a punto di test di citotossicità su linee cellulari da pazienti e saggi enzimatici per la valutazione dell'attività anti-proliferativa e/o pro-apoptotica di sostanze sintetiche o di derivazione

Azioni

Attività da svolgere

- Verifica dei modelli in vitro mediante impiego di molecole interferenti con vie biochimiche note- Isolamento di nuovi prodotti genici candidati mediante studi di genomica, proteomica, metabolomica- Identificazione di alterazioni biomolecolari associate a malattia e loro validazione come nuovi biomarcatori- Progettazione e sintesi di nuove molecole ad azione specifica sulle vie biochimiche identificate- Verifica delle nuove molecole su sistemi cellulari in vitro per definirne l'efficacia anti-proliferativa e/o pro-apoptotica- Studio di diversi sistemi per il trasferimento intracellulare delle molecole farmacologiche selezionate- Studi di espressione e saggi di attività enzimatica sulle cellule in vitro trattate con le molecole selezionate- Verifica dei risultati ottenuti, mediante impiego di un numero significativo di modelli cellulari noti- Valorizzazione dei risultati al fine di sviluppare nuovi approcci terapeutici

Punti critici e azioni da svolgere

- Isolamento di nuovi prodotti genici bersaglio- Identificazione di nuove molecole ad attività antitumorale di ridotta complessità strutturale- Ottenimento di molecole adatte all'uso in vivo, in modelli animali- Sviluppo di protocolli e kit di lavoro per il trasferimento delle biotecnologie sviluppate e dei biomarcatori identificati all'industria allo scopo di proporre sul mercato nuove applicazioni e nuovi prodotti (con particolare riferimento agli strumenti diagnostici da impiegare nella lotta ai tumori)- Contatti con industrie per la commercializzazione dei prodotti diagnostici e terapeutici- Traduzione di tutte le conoscenze acquisite significativamente associate al cancro in interventi di prevenzione sanitaria nei soggetti a rischio



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

-Studio strutturale e funzionale di nuovi meccanismi molecolari coinvolti nella trasformazione e progressione neoplastica -Isolamento di nuovi prodotti genici candidati mediante genomica e proteomica-Progettazione e sintesi di nuove molecole ad azione specifica sulle vie biochimiche identificate-Verifica di efficacia antiproliferativa e/o pro-apoptotica delle nuove molecole su sistemi cellulari in vitro -Studi di espressione e saggi di attività enzimatica su cellule in vitro trattate con le molecole selezionate-Modeling della struttura tridimensionale e studi conformazionali della proteina oncogenica BRAF-Individuazione e/o sintesi di inibitori delle proteine chinasi e delle fosforodiesterasi capaci di interferire con l'attività oncogenica delle proteine BRAF e h-prune -Studi NMR su prodotti di espressione e metaboliti candidati da linee cellulari e tessuti tumorali-Test biologici e raffinamento dei modelli/composti prodotti-Profilo farmacologico in vitro delle nuove molecole e raffinamento del design-Sviluppo di nuovi protocolli di struttura-attività- ottimizzazione delle proprietà farmacocinetiche e farmacodinamiche-Generazione di librerie di molecole

Collaborazioni (partner e committenti)

-Wellcome Trust Sanger Institute, Hinxton, UK-Institute of Cancer Research, Sutton Surrey, London, UK-National Institute on Aging, National Institute of Health, Baltimore, USA-National Cancer Institute, National Institute of Health, Frederick, USA-International Agency for Research on Cancer (IARC), Lyon, France-Istituto Anatomia Patologica, Università di Sassari-Centro di Osservazione Epidemiologica Multizonale, AUSL N.1, Sassari-Istituto Nazionale Tumori (INT), "Fondazione G. Pascale", Napoli-Istituto Dermatopatico dell'Immacolata (IDI), Roma-Istituto Europeo di Oncologia (IEO), Milano-Istituto Oncologico Romagnolo (IOR), Forlì-Associazione House Hospital onlus, Napoli-Intergruppo Melanoma Italiano (IMI)-Centro di Spettrometria di Massa e Proteomica, ISA-CNR, Avellino-Consorzio Porto Conte Ricerche, Alghero (SS)-Dipartimento di Oncologia, Biologia e Genetica, Università di Genova-Dipartimento di Chirurgia Generale II, Università di Cagliari-Dipartimento di Chirurgia Generale e Oncologia Clinica, Università di Bari-Industria Farmaceutica SERONO S.p.A., Roma-Industria SCHERING-PLOUGH, Milano

Finalità

Obiettivi

Attraverso la definizione delle correlazioni esistenti tra struttura e funzione nei tumori umani, si intende: comprendere i meccanismi molecolari in condizioni fisiologiche e patologiche; comprendere le interazioni molecolari tra ligandi selezionati (agonisti e antagonisti recettoriali, inibitori enzimatici, ecc.) ed i prodotti genici bersaglio, nonché gli effetti sul fenotipo (per es., modificazioni del grado di malignità e/o di atipia in cellule neoplastiche); identificare nuovi bersagli biologici (biomarcatori) per la creazione di kit diagnostici ad uso clinico e per la produzione di molecole ad attività terapeutica per l'industria farmaceutica attraverso studi integrati genomici, proteomici e metabolomici.

Risultati attesi nell'anno

-Ottenimento di nuovi protocolli di analisi cellulare e molecolare ad uso diagnostico-Definizione di nuovi modelli di meccanismi molecolari della tumorigenesi -Definizione di nuovi protocolli per il riconoscimento molecolare e per gli studi computazionali dei punti di interazione tra le proteine bersaglio candidate e le molecole a putativa attività farmacologica

Potenziale impiego

- per processi produttivi

-Definizione dei rapporti struttura/funzione delle molecole proteiche la cui espressione e/o attività è alterata nei tumori, che possano costituire nuovi marcatori associati a malattia (diagnosi, prognosi, ecc.)-Sviluppo ed allestimento di kit innovativi di diagnosi molecolare ad uso clinico-laboratoristico

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

I dati ottenuti avrebbero una ricaduta clinica a breve termine, nel senso che renderanno possibile correlare routinariamente la diagnosi "classica" (istopatologica, laboratoristica e clinico-strumentale) con una diagnosi genetico-molecolare. Questo potrà consentire di intraprendere procedimenti terapeutici più mirati, "personalizzando" sempre più i protocolli di terapia medica antitumorale con enormi benefici per l'intera popolazione neoplastica. Potrà inoltre essere possibile sottoporre un paziente ad una terapia chirurgica meno demolitiva, a condizione che il tumore non abbia evidenziato alterazioni molecolari o che le alterazioni genetico-molecolari e funzionali ritrovate siano quelle associate ad una prognosi più favorevole. Il progetto di ricerca consentirà quindi l'identificazione di un numero minimo di biomarcatori molecolari clinicamente e patologicamente significativi, in grado di svolgere un ruolo decisivo nella pratica clinico-laboratoristica (diagnosi, prognosi e risposta terapeutica).



Moduli

Modulo: Studi di NMR su prodotti di espressione e vie metaboliche coinvolte nella tumorigenesi

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Studi di correlazione genetica dei biomarcatori molecolari nei tumori

Istituto esecutore: Istituto di genetica e biofisica 'Adriano Buzzati Traverso'

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Analisi proteomica nei tumori

Istituto esecutore: Istituto di scienza dell'alimentazione

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
219	0	0	0	219	0	0	14	N.D.	233

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
4	5

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	0	0

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



C.R.C. DIAGNOSTICA E FARMACEUTICA MOLECOLARI

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	CENTRO REGIONALE DI COMPETENZA IN DIAGNOSTICA E FARMACEUTICA MOLECOLARI
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	CARLO PEDONE

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.	liv.
Vassallo Ferdinando	I	Vianello Ermanno	VI	

Temi

Tematiche di ricerca

Il progetto del CRdC DFM prevede un 'progetto dimostratore' funzionale all'integrazione dei vari soggetti partecipanti in una rete multidisciplinare di ricerca e sviluppo. La tematica di ricerca affrontata nel progetto dimostratore è legata all'individuazione, allo sviluppo e alla caratterizzazione di nuovi lead compounds ad azione antiangiogenica utilizzando tre sistemi modello: i gangliosidi da organismi marini, l'integrina avb3 e i recettori del VEGF e i loro ligandi naturali.

Stato dell'arte

Nel campo della produzione di nuove molecole utilizzabili in diagnostica e in terapia, il processo che porta dalla scoperta di una nuova molecola bioattiva alla commercializzazione della stessa è intrinsecamente lento e difficoltoso. In particolare, sono individuabili diverse fasi per giungere allo sviluppo di nuove molecole. Mentre le prime fasi vedono attivo soprattutto il mondo della ricerca accademica, procedendo verso le fasi più avanzate, ed avvicinandosi quindi progressivamente alla produzione commerciale di nuove molecole, la partecipazione di istituzioni private e di aziende aumenta di importanza. In Campania sono presenti numerose e prestigiose istituzioni pubbliche coinvolte in differenti aspetti della ricerca su composti bioattivi nell'organismo umano. Le strutture che esprimono tali competenze collaborano a progetti di ricerca nazionali ed internazionali e sono disseminate uniformemente nel territorio regionale. La costituzione del CRdC DFM ha permesso di integrare queste conoscenze in una rete omogenea e completa, in grado di rispondere alle esigenze delle imprese del settore.

Azioni

Attività da svolgere

Per quanto riguarda le attività scientifiche si prevede di implementare prevalentemente le attività connesse allo sviluppo in vivo delle molecole già descritte e brevettate nel corso del 2005. Inoltre si procederà all'estensione dei brevetti in Europa oppure a livello mondiale. Per quanto riguarda le attività scientifiche del protocollo aggiuntivo WP11 esse saranno finalizzate nel corso dell'anno grazie soprattutto all'apporto tecnologico che deriverà dall'acquisizione dei sistemi robotici. Per quanto riguarda le attività gestionali e organizzative del Centro, è prevista la continuazione del lavoro di raccordo tra i vari soggetti attuatori e tra i soggetti attuatori, il territorio e le aziende con cui collaborano scientificamente. È previsto inoltre il completamento del piano delle acquisizioni delle attrezzature previste dal capitolato. Coordinamento e gestione del nuovo progetto di formazione per 50 laureati in discipline scientifiche attinenti alla diagnostica e farmaceutica molecolare.

Punti critici e azioni da svolgere

Verifica della effettiva capacità di autofinanziamento sulla base delle opzioni strategiche del business plan. Verifica della effettiva integrazione e cooperazione tra i soggetti attuatori, le imprese ed il territorio. Verifica delle opzioni organizzative relative alla costituzione del soggetto giuridico. Coordinazione del nuovo progetto di formazione.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Lo spettro di competenze coperte dai vari soggetti coinvolte nel progetto del CRdC DFM è quanto mai diversificato e completo. Tali competenze possono essere raggruppate nelle seguenti aree tematiche: 1)



Sostanze naturali; 2) Chimica di macromolecole; 3) Sintesi di composti bioattivi; 4) Biologia molecolare e biochimica; 5) Analisi funzionale di composti bioattivi in vitro e in vivo; 6) Diagnostica e Imaging.

Collaborazioni (partner e committenti)

Partner nella realizzazione del progetto sono: Istituto di Biostrutture e Bioimmagini del CNR - Istituto di Genetica e Biofisica "Adriano Buzzati - Traverso" del CNR - Centro di Servizi Interuniversitario di Analisi Strumentale Università degli Studi di Napoli "Federico II" - Dipartimento di Scienze Farmaceutiche Università di Salerno - Dipartimento di Scienze Neurologiche Seconda Università di Napoli - Dipartimento delle Oncologie Sperimentali Istituto Nazionale per la Cura e lo Studio dei Tumori "Fondazione G.Pascale" - Dipartimento di Scienze Biomorfologiche e Funzionali Università di Napoli. Committente del progetto è la Regione Campania che utilizza prevalentemente fondi del FESR dell'UE.

Finalità

Obiettivi

La missione finale del CRdC DFM può essere sintetizzata nelle seguenti attività:- offrire un ambiente per la realizzazione di attività di ricerca basata sull'interesse industriale e per il trasferimento tecnologico dei risultati; - promuovere il diretto coinvolgimento delle imprese nel processo di realizzazione e di progettazione dell'innovazione;- determinare le condizioni per la nascita di nuove convenienze per le imprese in settori high-tech emergenti;- integrare attività di ricerca precompetitiva al fine di collocare sul mercato dei risultati della ricerca;- sostenere la domanda d'impresa di consulenza tecnologica. Obiettivo del progetto dimostratore è individuare, sviluppare e caratterizzare nuovi lead compounds ad azione antiangiogenica utilizzando tre sistemi modello: i gangliosidi da organismi marini, l'integrina avb3 e i recettori del VEGF e i loro ligandi naturali. I soggetti partecipanti al CRdC hanno competenze scientifiche e metodologiche complementari che consentono di affrontare lo studio di questi sistemi in modo multidisciplinare.

Risultati attesi nell'anno

E' previsto il completamento del piano delle acquisizioni delle attrezzature previste dal capitolato originario e quello relativo al WP11. Si prevede di ottenere nuovi dati a supporto delle proprietà farmacologiche e diagnostiche delle molecole già studiate nell'ambito del progetto dimostratore e quindi di depositare nuovi brevetti e di implementare ed estendere quelli esistenti. Si prevede di ottenere nuovi risultati scientifici dalle attività del WP11. Si prevede di riuscire a costituire la società consortile in cui confluiranno i risultati e le attrezzature del Centro. Saranno avviate le attività di Work on the Job-Formazione per 50 laureati nelle discipline della farmaceutica e diagnostica molecolare.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Il Centro di Competenza, una volta a regime e dotato di autonomia giuridica, potrà accedere a finanziamenti esterni al CNR, quali ad esempio FIRB, fondi europei, fondi ministeriali di ricerca industriale, commesse di ricerca da parte di aziende private del settore, raggiungendo quindi la fase di autosostentamento finanziario. All'autosostentamento potranno contribuire anche risorse finanziarie provenienti da cessioni di licenze di brevetti oppure contratti di consulenza. La presenza del centro nella regione campania potrà contribuire allo sviluppo economico e scientifico della regione favorendo ulteriormente l'aggregazione o la nascita di nuove realtà scientifiche ed industriali.

Moduli

Modulo: C.R.C. DIAGNOSTICA E FARMACEUTICA MOLECOLARI
Istituto esecutore: CENTRO REGIONALE DI COMPETENZA IN DIAGNOSTICA E FARMACEUTICA MOLECOLARI
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
123	0	2992	0	3115	350	3342	9	N.D.	3474

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
1	2

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	0	50	52

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione e sintesi di sistemi molecolari inorganici per diagnosi e terapia

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica inorganica e delle superfici
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	FIRENZO REFOSCO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Bolzati Cristina	III	Giustiniani Carla	VII	Tisato Francesco	III
Bonato Giuseppina	VIII	Moresco Annarosa Elvira	VIII	Zambolin Claudia	VII
Bullita Elvio	V	Porchia Marina	III		
Destro Pierina	IV	Refosco Fiorenzo	III		
		Tamburini Sergio	II		

Temi

Tematiche di ricerca

Preparazione di complessi di coordinazione di ^{99m}Tc , ^{188}Re e ^{64}Cu da utilizzare come radiofarmaci o radioterapici in medicina nucleare. Preparazione di complessi di coordinazione di Cu da utilizzare come agenti antitumorali. Preparazione di complessi di Mn come agenti di contrasto per applicazioni in MRI. Preparazione di reagenti di shift per metalli alcalini e alcalino-terrosi

Stato dell'arte

La SPET è tra le tecniche di imaging più usate in medicina nucleare. L'85% dei radiofarmaci usati è a base di ^{99m}Tc e quelli per l'imaging del miocardio coprono l'80% del mercato mondiale. La radioterapia con radionuclidi β^- emittitori è una metodica emergente per la cura delle forme tumorali primarie e metastatiche. Il ^{188}Re è tra i radionuclidi più promettenti per l'uso nella terapia radiometabolica perché ha proprietà nucleari ideali e una chimica molto studiata e sovrapponibile a quella del Tc . Il ^{64}Cu , prodotto recentemente da ciclotroni biomedici, per le sue proprietà nucleari può fungere da diagnostico (PET) e da radioterapico. I composti attualmente in sperimentazione clinica sono dei complessi di coordinazione di Cu^{2+} con leganti tetradentati con proprietà antitumorali già evidenziate. Crescente è l'interesse della ricerca per ottenere nuovi agenti per MRI e LIS per estendere il campo di applicazione di queste tecniche diagnostiche non invasive.

Azioni

Attività da svolgere

Progettazione e studio di sistemi molecolari di ioni metallici per la diagnostica mediante SPET (^{99m}Tc), PET (^{64}Cu), MRI (Mn), LIS-reagent, per la radioterapia (^{188}Re) e per l'oncologia (Cu). Sintesi di composti con leganti PNP secondo la strategia del "frammento metallico": stabilizzazione del metallo con una difosfina e sostituzione selettiva degli altri leganti labili con uno bidentato con specifici donatori, coniugabile a una biomolecola che dirige il sistema molecolare verso i tessuti target. Realizzazione con nuovi metodi di sintesi di librerie di leganti PNP ($\text{R}'\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{PR}_2)_2$) per lo studio della relazione struttura-attività. Incremento dell'uptake cardiaco del "lead compound" [$^{99m}\text{Tc}(\text{N})(\text{PNP}_5)(\text{DBODC})$] $^+$ modificando il backbone dei leganti. Marcatura con ^{99m}Tc di biomolecole (es. CCK, biotina) con il frammento metallico. Sintesi di leganti tetradentati P_2N_2 ($\text{R}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{NPr}_{1/2}$) $_2$ per la stabilizzazione di Re , Cu e Mn . Derivatizzazione di P_2N_2 con linker coniugabili a biomolecole. Progettazione e studio di reagenti di shift paramagnetici con leganti compartimentali eterobinucleari con siti selettivi per lantanidi, metalli alcalini e alcalino-terrosi per analisi biomediche e studi NMR

Punti critici e azioni da svolgere

Aumento della captazione cardiaca e del 'first pass' per gli analoghi derivati del "lead compound" [$^{99m}\text{Tc}(\text{N})(\text{PNP}_5)(\text{DBODC})$] $^+$. Sintesi di fosfine PNP con purezza >95%. Purezza radiochimica dei prodotti marcati >95%. Determinazione della corretta lunghezza del linker tra biomolecola e complesso $\text{Tc}(\text{N})(\text{PNP})(\text{Cys-linker})$ per mantenere inalterata l'affinità con i recettori specifici. Trasferimento della chimica dei complessi $\text{Cu-P}_2\text{N}_2$ a livello di tracciante ^{64}Cu . Disponibilità di ^{64}Cu dalla ACOM. Funzionalizzazione con gruppi solfonici o acidi per migliorare la solubilità in H_2O dei complessi per LIS. Alta disponibilità di



tempo macchina NMR per valutare la qualità e la quantità di interazione paramagnetica con i metalli alcalino o alcalino-terrosi nei complessi progettati come reagenti di shift.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi, in condizioni anaerobiche, di fosfine alifatiche e loro derivatizzazione, sintesi di ditiocarbammati. Marcatura dei leganti con radionuclidi (^{99m}Tc , ^{188}Re e ^{64}Cu). Sintesi di leganti fosfino-amminici P₂N₂ e preparazione di complessi con Re, Cu e Mn. Sintesi di leganti compartimentali con specifica selettività e solubilità. Prove di stabilità in vitro e comportamento in vivo dei complessi marcati con ^{99m}Tc e ^{64}Cu . Caratterizzazione dei composti con tecniche NMR, IR, UV, massa (ESI, MALDI) e HPLC.

Collaborazioni (partner e committenti)

Prof. G. Bandoli – Università di Padova. Proff. G. Gioiobbia e C. Santini – Università di Camerino. Dott. P. Traldi – ISTM-CNR – Padova. Prof. G. Morelli Dip. di Chim. Biol. e Centro Interuniversitario per la Ricerca sui Peptidi Bioattivi, Uni Federico II Napoli. Dott. H.-J. Pietzsch – Forschungszentrum – Rossendorf Dresda. ACOM S.p.A. – Montecosaro (MC). Nihon Medi-Physics Co., Ltd. – Tokio, Japan. Prof. P. Di Bernardo e Prof. P. Zanonato – Università di Padova. Prof. M. Botta – Università del Piemonte Orientale. Prof. S. Aime – Università di Torino.

Finalità

Obiettivi

Ottimizzazione di un radiofarmaco di Tecnezio-99m per lo studio della funzione miocardica partendo dal “lead compound” $^{99m}\text{Tc}(\text{PNP5})(\text{DBODC})$ e sintetizzando una libreria di leganti difosfinoamminici (PNP5 derivati) e ditiocarbammati (DBODC derivati). Marcatura di molecole con attività biologica con Tecnezio-99m, mediante il metodo del frammento metallico. Ricerca delle dimensioni ottimali dello spaziatore (linker) tra complesso e biomolecola. Progettazione e sintesi di leganti difosfinodiamminici per la coordinazione di ^{64}Cu , ^{188}Re e Mn^{2+} . Progettazione e preparazione di leganti aciclici e ciclici compartimentali eterobinucleari contenenti siti selettivi per i lantanidi(III) e metalli alcalini e alcalino-terrosi da usare come agenti per MRI e LIS.

Risultati attesi nell'anno

Progettazione e sintesi dei seguenti leganti difosfinici tipo $\text{PNP} = \text{R}^2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{NR}'\text{CH}_2\text{CH}_2\text{PR}^2$ ($\text{R} = \text{Me}$, $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OMe}$, CH_2OH ; $\text{R}' = \text{Me}$, $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OEt}$, $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OEt}$, $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OPr}$) per la preparazione di ^{99m}Tc -nitruro complessi cationici del tipo $[\text{Tc}(\text{N})(\text{PNP})(\text{DTC})]^+$ (DTC = ditiocarbammato) per la migliorare la perfusione cardiaca e il “first pass”. Sintesi del legante tetradentato aciclico P₂N₂ $[(\text{HOCH}_2)_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{NPr}^{1/2}]_2$, studio della sua reattività con ReO_3^+ , Cu^{+2} e Mn^{2+} . Sintesi e caratterizzazione di complessi $^{99m}/^{99}\text{TcN}(\text{PNP})(\text{Cys-linker-Bio})$ (Bio = CCK, Biotina). Studio della corretta dimensione del linker, verifica dell'affinità con i siti recettoriali. Determinazione della stabilità in vivo e in vitro di tutti gli agenti a base di ^{99m}Tc . Verifica delle proprietà magnetiche del complesso $\text{Mn-P}_2\text{N}_2$ e studio degli equilibri in soluzione. Messa a punto di complessi, altamente selettivi e con alta stabilità e solubilità in H₂O, di lantanidi come reagenti di shift. Funzionalizzazione dei leganti con i) pendant-arm fenolici e/o acidi per stabilizzare lo ione metallico Ln(III), ii) gruppi idrofili per aumentare la solubilità in acqua. Relativi studi di stabilità in H₂O dei complessi.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Radiofarmaci e farmaci per la diagnostica per immagini e radioterapici per la terapia antitumorale.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Nuove tecniche di indagine per varie patologie principalmente cardiache e di cura dei tumori. Miglioramento della qualità della vita ed aumento della sopravvivenza di malati terminali

Moduli

Modulo: Progettazione e sintesi di sistemi molecolari inorganici per diagnosi e terapia

Istituto esecutore: Istituto di chimica inorganica e delle superfici

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
297	182	0	0	479	20	202	54	N.D.	553

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
4	6

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	2	2

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Bioprospecting: sviluppo di prodotti e processi metabolici di origine naturale

Dati generali

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ANGELO FONTANA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Aiello Antonella	V	Fontana Angelo	III	Mollo Ernesto	III
Andreotti Giuseppina	III	Gambacorta Agata	I	Motta Andrea	II
Buonomo Antonio	VIII	Gavagnin Capoggiani	II	Ricciardi Desiderata	V
Castelluccio Francesco	VI	Margherita		Romano Ida	VI
Ciavatta Maria Letizia	III	Iodice Carmine	V	Salzano Loredana	V
Cimino Guido	I	Lopez Aniello	VI	Trincone Antonio	III
Cutignano Adele	III	Maiello Antonio	VI	Turco Raffaele	V
De Rosa Salvatore	I	Manzo Emiliano	III	Villani Guido	III
Di Pinto Corrado	IV	Matto Daniela	VII	Zampa Maurizio	V
		Melck Dominique Juliette	VI		

Temi

Tematiche di ricerca

Studi e metodologie biomolecolari per l'identificazione e lo sfruttamento farmaceutico ed energetico di molecole e processi biologici naturali. In particolare, la proposta si articola su due principali attività di ricerca: "Molecole bioattive da organismi marini per applicazioni in farmaceutica (attività antitumorale o immunoregolatrice) e cosmetica (preparazioni antiaging)" e "Basi molecolari della produzione con finalità energetiche di idrogeno da fonti biologiche". La prima tematica implica la caratterizzazione e la promozione di molecole naturali di origine marina come lead compounds per l'industria farmaceutica e cosmetica. Il secondo modulo è legato allo studio dei processi metabolici associati alla produzione di idrogeno in fonti rinnovabili, quali microrganismi o consorzi microbici, wild-type o geneticamente modificati. Lo spirito è quello di studiare, migliorare e dimostrare su scala pilota, la produzione di idrogeno da fonti naturali, nell'ottica di ottenere un approvvigionamento a scopi energetici del gas. Le due tematiche sono accomunate dallo studio e sfruttamento di processi metabolici naturali

Stato dell'arte

Bioprospecting si riferisce alla selezione a scopo commerciale di risorse naturali, ad esempio specifici organismi biologici o metodi fermentativi, per ottenerne medicine. Negli ultimi anni, tuttavia, il progresso tecnologico e scientifico ha tramutato il bioprospecting in un campo di ricerca avanzata che, in funzione di applicazioni biotecnologiche e sviluppo di modelli molecolari, comprende lo studio di metaboliti e processi metabolici naturali per lo sviluppo di prodotti o processi di utilità. Il solo aspetto farmaceutico è di grande rilievo. Ad esempio, la percentuale di farmaci che deriva direttamente da prodotti naturali è del 61%, se consideriamo le molecole commercializzate nel ventennio 1981-2002, o addirittura dell'80% se guardiamo al biennio 2002-2003. Si tratta di un mercato enorme (stimato nel 2004, per i soli antitumorali, in circa 2500 milioni di Euro), esclusivamente dipendente da molecole e processi naturali, che subirà un ulteriore sviluppo nei prossimi anni, quando i progressi delle tecniche genetiche dovrebbero dar vita ad un ulteriore aumento del numero di strutture e processi metabolici disponibili per applicazioni industriali.

Azioni

Attività da svolgere

Lo sviluppo di composti naturali utilizzabili come tools farmacologici o candidabili come lead compounds per lo sviluppo farmaceutico (in particolare, antitumorali e immunoregolatori) mira all'individuazione di analoghi della jorumycina (il principio attivo del farmaco antitumorale Zelapys), di terpeni e polichetidi bioattivi (come scalaradiolo, avarolo o kahalide), oppure la produzione da fonti a basso costo di molecole già disponibili commercialmente (HETE, HEPE, epoxyline, leucotrieni, carotenoidi). L'attività riguarda sia la selezione delle molecole bioattive da estratti naturali sia quegli aspetti (quali definizione dei pathway biochimici e genetici, ovvero colture e produzione in vitro delle molecole) da cui dipendono l'ottenimento



biotecnologico dei composti, vero ostacolo allo sviluppo farmaceutico di un prodotto naturale. Lo studio sulla produzione di bio-idrogeno riguarda, invece, la caratterizzazione degli organismi produttori, l'identificazione e modifica dei pathways metabolici, al fine di riprodurre il processo in condizioni biomimetiche e di fornire una dimostrazione dell'utilità applicativa su scala pilota.

Punti critici e azioni da svolgere

L'attività proposta richiede l'integrazione di competenze diverse di chimici organici e biochimici, biologi molecolari e biologi marini. Come in tutti i progetti multidisciplinari, l'integrazione delle attività rappresenta una criticità che, in questo caso, potrebbe essere ulteriormente accentuata dal fatto che alcune di queste competenze sono esterne alla commessa. Un secondo aspetto delicato è costituito dal fatto che l'attività di ricerca poggia su tecniche estremamente avanzate e, quindi, costose. Ad esempio, lo studio dei fenomeni molecolari connessi alla produzione di idrogeno richiede crescita di organismi anaerobi, modificazioni genetiche ed analisi di reti metaboliche attraverso metabolomica e genomica. Analogamente lo sviluppo farmaceutico di prodotti naturali richiede, tra l'altro, spedizioni attrezzate per la raccolta degli organismi oppure la strumentazione per la caratterizzazione di microgrammi del composto attivo. E' quindi ovvio che è necessario un piano economico per il mantenimento delle apparecchiature. Così come è essenziale affiancare alla struttura di ricerca una struttura di sviluppo e promozione delle molecole e dei processi selezionati.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Lo sviluppo delle tematiche proposte può contare sull'attività pregressa e su una fitta rete di collaborazioni nazionali ed internazionali nei seguenti settori: a) isolamento e caratterizzazione chimica dei metaboliti, con analisi (metabolomica e lipidomica) da cellule/organismi naturali o geneticamente modificati; b) biochimica di lipidi e metaboliti secondari, con caratterizzazione dei pathway metabolici; c) selezione delle fonti biologiche, mediante selezione degli organismi e allestimento di colture cellulari e di microrganismi. Da un punto di vista tecnologico, l'aspetto caratterizzante è l'identificazione di composti bioattivi attraverso saggi cellulari e recettoriali (attivazione apoptosi, inibizione e proliferazione su linee cellulari tumorali/linfocitarie, produzione di citochine, stress ossidativo, inibizione ciclossigenasi) e dei fattori che ne consentano lo sfruttamento commerciale, sia l'individuazione e la dimostrazione di produzione di idrogeno da fonti biologiche attraverso consorzi microbici ed organismi geneticamente modificati.

Collaborazioni (partner e committenti)

L'attività di ricerca ha goduto di specifici finanziamenti straordinari da fonti nazionali ed internazionali. In particolare, la cifra è in stabile crescita, come dimostra il fatto che i quasi 600'000 Euro nel periodo 1999 al 2004 sono diventati più di 1,1 milioni di Euro (già disponibili) per i prossimi 3 anni. Sicuramente a questo ha contribuito la collaborazione con strutture di ricerca pubblica e privata, tra le quali annoveriamo importanti partnership industriali (Phamamar SaS) ed accademiche sia italiane (ENEA e molti Istituti CNR ed Università Italiani) che straniere (Shanghai Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Sciences, National Institute of Engineering and Industrial Technology (INETI, Portugal), University of Queensland (Australia), Russian Academy of Sciences (RAS), University of Athens, Consejo Superior Investigaciones Científica (Spain), National Institute of Oceanography (India), University of Mainz (Germania), University of British Columbia (Canada).

Finalità

Obiettivi

Molecole bioattive da organismi marini per applicazioni in farmaceutica (attività antitumorale o immunoregolatrice) e cosmetica (preparazioni antiaging). Basi molecolari della produzione con finalità energetiche di idrogeno da fonti biologiche

Risultati attesi nell'anno

Ottenimento di composti a basso peso molecolare ed elevato interesse biologico da organismi marini, incluso fonti non tradizionali, con valutazione delle potenziali applicazioni biotecnologiche (in particolare, industria farmaceutica e cosmetica) e miglioramento dell'indice terapeutico di composti specifici (ad esempio, avarolo); Caratterizzazione dei processi molecolari coinvolti nella produzione di idrogeno in consorzi e/o organismi unicellulari wild-type o geneticamente modificati, nonché identificazione di nuove attività enzimatiche in biomasse produttrici di idrogeno, ottimizzazione di specifici processi enzimatici per reazioni su scala preparativa ed improvement biotecnologico. Brevetti o trasferimento tecnologico ad aziende private dei risultati provenienti dalle attività summenzionate. Produzione su scala di laboratorio di composti ad alto valore aggiunto (HETE, HEPE, resolvins, leucotrieni) di utilità farmacologica e commerciale utilizzando enzimi o pathway enzimatici di organismi marini.



<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	0	0

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto



Correlazioni struttura-proprietà e metodologie innovative per la caratterizzazione dei sistemi polimerici

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	PELLEGRINO MUSTO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Abbate Mario	III	Esposito Anna	VII	Principe Anna	V
Amelino Luciano	IV	Ferraro Patrizia	VII	Ragosta Giuseppe	I
Avella Maurizio	II	Fiore Emanuele	VI	Raimo Maria	III
Calandrelli Luigi	VII	Immirzi Barbara	III	Russo Antonietta	VIII
Cimmino Sossio	II	Iovinelli Rosa	VII	Russo Pietro	III
D'Orazio Loredana	III	Lahoz Antonio	VII	Russo Roberto	III
De Luca Pasquale	VIII	Malinconico Mario	II	Scafora Ennio	IV
De Rosa Diana	VII	Mancarella Carlo	IV	Scarinci Gennaro	III
Di Liello Vincenzo	V	Musto Pellegrino	II	Silvestre Clara	III
Di Lorenzo Maria Laura	III	Narciso Giuseppe	V	Tagliatela Achille	IV
Di Pace Emilia	III	Nazzaro Raffaele	VII		
Errico Maria Emanuela	III	Orefice Giustino	VIII		
		Palumbo Francesco	IV		

Temi

Tematiche di ricerca

Realizzazione di nuovi nanocompositi a matrice termoindurente o termoplastica attraverso tecnologie sol-gel, polimerizzazione in massa o estrusione. Sintesi e caratterizzazione di poliimmidi funzionali e relativi ibridi per impieghi nel settore delle fuel cells, della microelettronica e delle tecnologie di separazione. Studio dell'influenza di cariche nanometriche sui processi di cristallizzazione di polimeri commerciali. Applicazione di tecniche di spettroscopia vibrazionale allo studio della diffusione e delle interazioni molecolari nei polimeri; meccanica della frattura per lo studio dei meccanismi molecolari di deformazione. Analisi dei processi di rilassamento secondari mediante misure dinamico-meccaniche e modellistica molecolare. Nuovi approcci teorico-sperimentali nella calorimetria modulata.

Stato dell'arte

La commessa prende le mosse da un scenario dinamico in cui i materiali polimerici, sempre più pervasivi in tutti i settori di applicazione, evolvono rapidamente da opzioni 'cost-effective', a sistemi in grado di rispondere alle più sofisticate esigenze tecnologiche. Infatti le nuove tecnologie che emergono costantemente necessitano di materiali funzionali con caratteristiche molto specifiche. In questi settori ad elevato impatto applicativo la sfida è quella di riuscire a produrre nuovi polimeri o a modificarne di già esistenti in modo da ottenere le prestazioni richieste. Esempi significativi di nuovi settori tecnologici in cui la commessa si inserisce attraverso la progettazione, realizzazione e caratterizzazione di materiali polimerici 'ad hoc' sono le fuel-cells (poliimmidi sulfonate), i materiali polimerici per la microelettronica (poliimmidi e relativi ibridi), gli adesivi e coatings ad elevate prestazioni (epossidiche e relativi nanocompositi), l'imballaggio alimentare (nanocompositi a matrice poliolefinica) le tecnologie di separazione (poliimmidi funzionalizzate, nanocompositi).

Azioni

Attività da svolgere

Realizzazione di materiali polimerici specifici per l'utilizzo nelle 'fuel cells' (nafion modificato, poliimmidi sulfonate) caratterizzazione molecolare, morfologica, meccanica, e di trasporto dei materiali realizzati. Realizzazione e caratterizzazione di materiali ibridi nanostrutturati a morfologia bifasica o co-continua. Analisi delle possibili applicazioni nel settore della microelettronica e nelle tecnologie di separazione. -Studio dei processi di formazione e dell'evoluzione delle strutture cristalline in omopolimeri e miscele polimeriche. -



Metodologie innovative di caratterizzazione basate sulla spettroscopia FTIR e Raman, la calorimetria, le proprietà meccaniche, dinamico-meccaniche e di frattura e la microscopia elettronica e a forza atomica.

Punti critici e azioni da svolgere

Gli obiettivi sono da considerarsi altamente realizzabili sulla base delle competenze presenti e dei finanziamenti. Come punti critici si possono citare : a) ottimizzazione della struttura molecolare e della morfologia dei materiali polimerici da utilizzare nella tecnologia delle 'fuel cells'. b) metodologie preparative per la realizzazione di nanocompositi a matrice epossidica. c) complessità delle regioni interfasiche e relativa caratterizzazione. d) arruolamento di nuove figure professionali in grado di sviluppare temi di ricerca avanzati

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Preparazione di materiali ibridi a matrice poliimmidica con morfologia micrometrica o nanometrica mediante tecniche sol-gel. Sintesi e funzionalizzazione di poliimmidi. Preparazione di nanocompositi a matrice epossidica mediante miscelazione reattiva. Preparazione e caratterizzazione di nanocompositi a matrice poliolefinica mediante miscelazione dal fuso/estrusione. Tecniche preparative per film sottili (spin-coating). Caratterizzazione molecolare mediante spettroscopia FTIR, FT-NIR e Raman. Caratterizzazione strutturale con metodi diffrattometrici ai raggi X (WAXS, SAXS). Analisi termica mediante DSC, DSC modulato, TGA. Microscopia ottica, elettronica e a forza atomica. Proprietà meccaniche meccanico-dinamiche e di frattura.

Collaborazioni (partner e committenti)

University of Loughboroug, UK, Prof. L. Mascia; University of Tennessee, Prof. B. M. Wunderlich; Institute of Macromolecular Chemistry, IASI, Romania, Prof. C. Vasile; Bulgarian Academy of Science, Prof. R. Kotsilkova; Polish Academy of Science, Prof. A. Galeski; Università Federico II, Prof. G. Mensitieri; Università di Salerno, Prof. G. Guerra; Università di Lecce, Prof. M. Frigione; Centro Ricerche Fiat-Elasis, Ing. L. Zeloni; ST microelectronics.

Finalità

Obiettivi

Realizzazione e caratterizzazione di materiali micro e nanostrutturati con elevata stabilità foto- e termo-ossidativa e migliorate proprietà meccaniche e di barriera rispetto ai polimeri convenzionali. Realizzazione e caratterizzazione di materiali polimerici funzionali per l'utilizzo nella tecnologia delle fuel-cells. Sviluppo di materiali polimerici con caratteristiche mirate attraverso il controllo dei processi di cristallizzazione e mediante miscelazione reattiva e non. Sviluppo di metodologie d'indagine non convenzionali per la caratterizzazione molecolare, morfologica, e meccanica dei polimeri.

Risultati attesi nell'anno

Materiali polimerici funzionali per l'impiego nella tecnologia delle 'fuel cells'. Nanocompositi a matrice epossidica per impieghi nel settore dei 'coatings'. Nanocompositi a matrice poliolefinica per impieghi nel settore dell'imballaggio. Metodiche d'indagine spettroscopica, termica, morfologica e meccanica.

Potenziale impiego

-per processi produttivi

I potenziali impieghi dei prodotti della ricerca riguardano i seguenti settori 1. Energia 2. Aeronautica, aerospazio 3. Industria automobilistica 4. Microelettronica e optoelettronica 5. Membrane 6. Adesivi, coatings 7. Imballaggio

-per risposte a bisogni individuali e collettivi

Gli obiettivi della commessa riguardano l'ottenimento di materiali per tecnologie con forte impatto sulla collettività, come l'energia, l'elettronica per uso domestico o industriale, i trasporti, la conservazione degli alimenti.

Moduli

Modulo:	Correlazioni struttura-proprietà e metodologie innovative per la caratterizzazione dei sistemi polimerici
Istituto esecutore:	Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
861	211	56	279	1407	264	531	140	N.D.	1811

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
8	19

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	5	2	9

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sintesi di polimeri e progettazione di sistemi polimerici innovativi ad elevate prestazioni per lo sviluppo ecosostenibile

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MARIO MALINCONICO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Abbate Mario	III	Esposito Anna	VII	Palumbo Francesco	IV
Amelino Luciano	IV	Ferraro Patrizia	VII	Principe Anna	V
Avella Maurizio	II	Fiore Emanuele	VI	Ragosta Giuseppe	I
Calandrelli Luigi	VII	Immirzi Barbara	III	Raimo Maria	III
Cimmino Sossio	II	Iovinelli Rosa	VII	Russo Antonietta	VIII
D'Orazio Loredana	III	Lahoz Antonio	VII	Russo Pietro	III
De Luca Pasquale	VIII	Laurienzo Paola	III	Russo Roberto	III
De Rosa Diana	VII	Malinconico Mario	II	Scafora Ennio	IV
Di Liello Vincenzo	V	Mancarella Carlo	IV	Scarinzi Gennaro	III
Di Lorenzo Maria Laura	III	Musto Pellegrino	II	Silvestre Clara	III
Di Pace Emilia	III	Narciso Giuseppe	V		
Errico Maria Emanuela	III	Nazzaro Raffaele	VII		
		Orefice Giustino	VIII		

Temi

Tematiche di ricerca

Modulo 1 Materiali polimerici innovativi per il settore agroalimentare e per applicazioni strutturali. Modulo 2 Materiali polimerici innovativi per l'energia sostenibile e per la salute dell'uomo. Modulo 3 Sistemi polimerici per l'industria tessile e calzaturiera. Le tematiche di ricerca, organizzate per moduli, hanno come denominatore comune la ricerca su tecnologie sostenibili nel settore dei materiali polimerici e delle loro miscele e compositi.

Stato dell'arte

Il progressivo esaurimento delle fonti petrolifere, la necessità di rispettare parametri ambientali sempre più stringenti per i paesi a tecnologia avanzata, costituiscono la nuova sfida che la chimica moderna deve raccogliere anche in parte per rimediare ad un passato in cui prodotti e processi venivano pianificati solo sulla base di criteri "economici" ma senza preoccuparsi del loro impatto sull'ambiente e sull'uomo. D'altronde i costi crescenti dei prodotti petroliferi e le conoscenze attuali della chimica e tecnologia di trasformazione dei polimeri naturali possono consentire in molti casi una riscoperta di materiali polimerici spesso acriticamente sottostimati o abbandonati a vantaggio di polimeri di sintesi. In questa ottica, anche i polimeri alla base delle applicazioni biomedicali risultano sempre più spesso provenire o direttamente da fonti naturali (polisaccaridi e proteine) o da intermedi ottenuti da fonti rinnovabili (lattidi, lattoni, eteri).

Azioni

Attività da svolgere

Modulo 1 Sviluppo di materiali a base di chitosano ed alginati in presenza di rinforzi fibrosi da fonti rinnovabili, quali gli scarti del pomodoro e del mais. Sviluppo di gel polimerici in grado di rallentare i processi di invecchiamento dei latticini, secondo un brevetto da noi recentemente depositato. Realizzazione e valutazione del comportamento meccanico di compositi realizzati con resina a base di acido polilattico e fibre di kenaf per applicazioni strutturali. Studio dell'effetto di differenti metodi di preparazione delle leghe, miscelazione, e dei masterbatch LDPE/EBAGMA e PET/EBAGMA sulla morfologia e proprietà delle leghe LDPE/PET da materiali di riciclo. Modulo 2 Realizzazione di coatings a base di polimeri acrilici fluorurati con pigmenti fotoattivi per bioreattori di produzione di idrogeno. Sviluppo di un nuovo processo per l'ottenimento di policaprolattone reticolato per la realizzazione di fibre e di scaffolds a rilascio controllato di



farmaci. Modulo 3 Sviluppo di materiali a migliorata sostenibilità a base di miscele binarie poli(butilene tereftalato) / poli(e-caprolattone) (PBT/PCL), effetto delle caratteristiche del PCL su miscibilità e funzionalità.

Punti critici e azioni da svolgere

Modulo 1 I film per l'agricoltura dovranno possedere proprietà meccaniche e di permeabilità idonee. Verranno effettuati i test di verifica delle suddette proprietà e della loro durata. Il controllo delle proprietà meccaniche e la composizione sono i parametri critici del gel per garantire la sua applicabilità. La resistenza al fuoco, l'assorbimento di acqua, l'isolamento termico ed acustico sono critici per l'utilizzo in edilizia dei compositi sostenibili, insieme al costo e alla durata (LCA). Il controllo della morfologia e, quindi, delle proprietà, delle leghe compatibilizzate LDPE/PET provenienti da operazioni di riciclo, sono i parametri critici per la loro applicazione. Modulo 2 I coating fotoselettivi per bioreattori produttori di idrogeno, dovranno consentire di controllare il rendimento delle colture microbiche. Verranno quindi determinati i parametri ottici e meccanici del coating stesso. Le proprietà fisiche e biochimiche degli scaffolds biomedicali dovranno garantire la colonizzazione e la crescita delle cellule tissutali ed il rilascio di principi. Modulo 3 La risposta meccanica dei materiali ottenuti rappresenterà il parametro critico.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze acquisite e consolidate nel corso degli anni nonché le tecnologie che vengono impiegate si possono così riassumere: a - Sintesi, modifica chimica e funzionalizzazione di polimeri. b - Processi di miscelazione e miscelazione reattiva. c - Tenacizzazione di polimeri termoplastici e termoindurenti. d - Realizzazione e studio di nanocompositi a matrice termoplastica e termoindurente. La strategia di ricerca si articola su vari livelli tra loro interconnessi: modulazione delle proprietà dei materiali in fase di sintesi, progettazione del sistema-prodotto, identificazione ed ottimizzazione del relativo processo produttivo. L'analisi della struttura molecolare viene effettuata con indagini chimiche (FTIR, viscosimetria, GPC, NMR) e chimico-fisiche (DSC, TGA, DMTA, RX). Le proprietà, ottiche, magnetiche, elettriche, meccaniche, di biocompatibilità e biodegradabilità, possono essere adeguatamente modulate al fine di controllare la risposta dei materiali alle più svariate sollecitazioni esterne. Ciò permette lo sviluppo di sistemi intelligenti in grado di assolvere funzioni complesse attraverso l'opportuna combinazione di una o più proprietà funzionali.

Collaborazioni (partner e committenti)

Committente: Università Padova (partner ENEA, ICB (CNR) Committente: EU-DGXII, VI P.Q. (Partner: Univ. Skopje, ICTM (Univ. Belgrado), CIDEMCO (E), MonDirect (E), Kefi SpA (I), Geonardo (HU), MOEPP (Macedonia), Studio R (Macedonia), IPBAS (Bulgarian Academy of Science), EuroKompozit (Macedonia), USKIM-Zimrant (Macedonia) Committente: EU LIFE Ambiente V P.Q. (Partner: Univ. di Bari, Univ. di Napoli Federico II, Univ. di Osnabrueck Germania, Novamont Novara, Polyeur Benevento, PSIAB Svezia) Committente: EU-DGXII, V P.Q. (Partner: Univ. Atene, Univ. Bari, PATI Italia, Novamont Italia, Cemagref Francia, VTT Finlandia) Committente: Regione Campania: UNINA, UNISA, IBP-CNR,

Finalità

Obiettivi

Sviluppare processi sintetici, di modifica chimica o di miscelazione mirati all'ottenimento di materiali innovativi per settori mirati di utilizzo. Ottenere nuovi materiali da fonti rinnovabili o biodegradabili. Migliorare le proprietà di materiali riciclati. Integrare polimeri e cariche o nanocariche mediante mirati interventi interfacciali. Trasferire le conoscenze acquisite al sistema imprese.

Risultati attesi nell'anno

Modulo 1 - Ottenere coatings polimerici per l'agricoltura a base di polisaccaridi e fibre vegetali a durata programmata e caratterizzati da basso costo. Ottenere film biodegradabili a base di polisaccaridi per l'imballaggio di prodotti alimentari deperibili con migliorate shelf-life o per la stagionatura naturale. Ottimizzare il comportamento meccanico di compositi fibrosi per l'edilizia ecosostenibile e comprendere i meccanismi di interazione interfacciale fibra-matrice. Comprendere i meccanismi di interazione chimici e chimico-fisici in miscele compatibilizzate LDPE/PET a partire da miscele di riciclo, allo scopo di ottimizzare la risposta meccanica. Modulo 2 - Realizzare polimeri acrilici perfluorurati con cromofori di diversa struttura innestati o dispersi e valutare le proprietà ottiche di film depositati. Realizzare un procedimento chimico per la reticolazione di policaprolattone e acido polilattico e studiare le proprietà termo-meccaniche dei materiali ottenuti. Modulo 3 Comprendere i meccanismi chimico-fisici che regolano il comportamento meccanico di leghe ecosostenibili tra PBT e PCL.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Sintesi di nuovi polimeri per il settore biomedicale o otticamente attivi per l'elettronica. Sviluppo di materiali da fonti rinnovabili a basso costo e loro miscele o anche in miscela con poliolefine per



agricoltura,agroalimentare, calzaturiero,tessile,imballaggi sostenibili,come compositi fibrosi per edilizia.Progettazione e realizzazione di termoindurenti con sistemi catalitici ecologici.

-per risposte a bisogni individuali e collettivi

E' sempre più evidente come la sostenibilità non può essere più un 'plus' nella progettazione di un nuovo materiale, ma un 'must'. Il progressivo esaurimento delle fonti petrolifere, la necessità di rispettare parametri ambientali sempre più stringenti per i paesi a tecnologia avanzata, costituiscono la nuova sfida che la chimica moderna deve raccogliere anche in parte per rimediare ad un passato in cui prodotti e processi venivano pianificati solo sulla base di criteri "economici" ma senza preoccuparsi del loro impatto sull'ambiente e sull'uomo. Queste problematiche sono di particolare rilevanza per le materie plastiche, che ancora oggi pagano la cattiva pubblicità del materiale 'usa e getta'.

Moduli

Modulo: Sintesi di polimeri e progettazione di sistemi polimerici innovativi ad elevate prestazioni per lo sviluppo ecosostenibile

Istituto esecutore: Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
756	211	575	279	1821	227	1013	134	N.D.	2182

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
9	17

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	4	0	0	0	0	0	4

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	7	2	11

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Polimeri, compositi e nanostrutture con proprietà funzionali programmate

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per i materiali compositi e biomedici
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	EUGENIO AMENDOLA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Aldi Alessandra	VI	De Vito Luigi	VII	Montanino Mario	III
Amendola Eugenio	II	Formicola Cira	VI	Morra Rodolfo	VI
Antonucci Vincenza	III	Giamberini Marta	III	Pracella Mariano	II
Bonetti Mariarosaria	VI	Giordano Michele	III	Segreti Francesca	VI
Borzacchiello Assunta	III	Greco Francesco	III	Tricoli Fabio	VII
Carotenuto Gianfranco	III	Iannace Salvatore	II		
De Santis Roberto	III	Lavorgna Marino	III		
		Marcedula Maria Rosaria	VI		

TemI

Tematiche di ricerca

Studio dei fattori controllanti la morfologia di nanocariche inorganiche in matrici polimeriche, modifica delle proprietà reologiche elongazionali in materiali per la produzione di schiume strutturali, studio dei meccanismi di trasporto di gas e vapori in membrane polimeriche, preparazione e caratterizzazione di film sottili di materiali organici ed inorganici per applicazioni optoelettroniche.

Stato dell'arte

Grandi sforzi di R&D sono rivolti alla progettazione ed alla caratterizzazione dei nuovi materiali, per adeguarne le proprietà ai requisiti. Tali materiali vanno ricercati in classi quali: a) nanocompositi, b) materiali superstrutturati e strutture intelligenti c) materiali ottenuti da fonti rinnovabili e biodegradabili. La ricerca relativa allo sviluppo di materiali innovativi deve necessariamente tenere conto dello studio delle correlazioni tra processo, materiali e proprietà del manufatto.

Azioni

Attività da svolgere

1 - Materiali ibridi e compositi. Conseguimento di elevate prestazioni termo-meccaniche di materiali polimerici rinforzati con una fase inorganica di dimensioni nanometriche. Studio di materiali e strutture composite intelligenti in grado di rispondere alle sollecitazioni esterne e lo sviluppo di materiali con proprietà barriera per imballaggio alimentare attivo. 2 - Materiali meso- e nanostrutturati. Progettazione e sintesi di materiali macromolecolari attraverso l'integrazione di una seconda fase (metalli nanometrici dispersi in matrici polimeriche) o la strutturazione di una mesofase (polimeri strutturalmente rigidi e coniugati) le cui proprietà funzionali ne permettono l'utilizzo per la realizzazione di dispositivi fotonici, ottici non-lineari, optoelettronici e sensori. 3 - Miscele polimeriche. L'attività di ricerca sui sistemi macromolecolari multicomponente include lo sviluppo di materiali per applicazioni tecnologiche ecosostenibili (polisaccaridi e di proteine termoplastificate) e lo sviluppo di miscele compatibilizzate con la tecnica del reactive processing (poliolefine, poliesteri e poliammidi).

Punti critici e azioni da svolgere

Non si prevedono per il momento particolari punti critici collegati a specifiche attività oggetto della commessa.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le attività di ricerca della commessa necessitano del contributo di competenze sviluppate sinergicamente nei settori della chimica, della fisica e dell'ingegneria dei materiali. In particolare, è indispensabile per il successo dell'iniziativa sviluppare la capacità di progettare nuovi materiali, realizzare gli stessi mediante sintesi organiche innovative e formulazioni di sistemi modificati e controllare le strutture molecolari su scala mesoscopica e nanoscopica al fine di trarre il massimo vantaggio dall'ottimizzazione delle relazioni proprietà



struttura. Le tecnologie da sviluppare in modo specifico sono necessarie a garantire un elevato controllo della morfologia dei materiali e della struttura molecolare, e interessano i settori delle deposizioni di film sottili e della preparazione di sistemi multifasici con un fattore di scala nanometrico. Per lo sviluppo di quanto evidenziato si utilizzeranno le tecniche di indagine più diffuse nel settore dei materiali polimerici e dei sistemi multifasici, ricorrendo a caratterizzazione strutturale, calorimetria, spettroscopia, morfologica.

Collaborazioni (partner e committenti)

Sono in corso collaborazioni di ricerca con: Università di Napoli Federico II, Università di Salerno, Centro Ricerche Fiat, ENEA, Centro di Cultura per le Materie Plastiche di Alessandria, ST Microelectronics.

Finalità

Obiettivi

1 - Identificazione di sistemi polimerici ibrido nanostrutturati a matrice termoplastica e termoindurente e sviluppo di una nuova metodologia di preparazione di organoclay. Sviluppo di materiali intelligenti e con proprietà barriera controllate per lo sviluppo di sensori molecolari e per il trasporto selettivo di gas e/o vapor. 2 - Sintesi controllata e caratterizzazione di dispositivi basati su quantum-dot metallici e semiconduttivi in polimero con proprietà magneto-ottiche e fotoniche. Progettazione e realizzazione di materiali per lo sviluppo di microsistemi e sensori molecolari. 3 - Sviluppo di sistemi polimerici multicomponente finalizzati allo sviluppo di applicazioni tecnologiche basate su criteri di ecoprogettazione, eventualmente ottenuti da fonti rinnovabili.

Risultati attesi nell'anno

Sono previste pubblicazioni scientifiche e/o brevetti e/o la realizzazione di dimostratori prototipali per i seguenti obiettivi: Identificazione di sistemi polimerici ibrido nanostrutturati. Sviluppo di materiali intelligenti attuativi. Sviluppo di materiali con proprietà barriera controllate per lo sviluppo di sensori molecolari e/o per il trasporto selettivo di gas e/o vapori. Progettazione e realizzazione di materiali (metalli nanometrici dispersi in matrici polimeriche e polimerici mesostrutturati) per lo sviluppo di microsistemi e sensori molecolari. Sviluppo di sistemi polimerici multicomponente finalizzati allo sviluppo di applicazioni tecnologiche basate su criteri di ecoprogettazione, eventualmente ottenuti da fonti rinnovabili.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

stampaggio ad iniezione e compressione di termoplastici nanorinforzati, stampaggio ad iniezione reattivo di resine termoindurenti nanorinforzate, "foaming" di termoplastici durante estrusione, filatura di polimeri con effetto barriera controllato, deposizione di film polimerici sottili con proprietà optoelettroniche, preparazione di materiali polimerici contenenti cluster metallici nanometrici con proprietà fotoniche ed optoelettroniche.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Produzione di componenti strutturali nel settore dei trasporti, in particolare automobilistico ed aeronautico; produzione di membrane per packaging alimentare; produzione di schiume polimeriche per imballaggio; produzione di microsistemi prototipali con funzioni optoelettroniche.

Moduli

Modulo: Polimeri, compositi e nanostrutture con proprietà funzionali programmate

Istituto esecutore: Istituto per i materiali compositi e biomedici

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
465	0	160	194	819	597	757	73	N.D.	1489

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
6	12

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	0	0	0	5	5

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	3	2	5

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Biomateriali ed ingegneria dei tessuti

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per i materiali compositi e biomedici
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	LUIGI AMBROSIO

Elenco dei partecipanti

Ambrosio Luigi	liv. I	Cristallini Caterina	liv. III	Guerra Giulio Dante	liv. II
Borzacchiello Assunta	III	De Santis Roberto	III	Tricoli Mario	IV
Cerrai Piero	II				

Tem

Tematiche di ricerca

-Polimeri e compositi per la rigenerazione dei tessuti duri. Tale attività riguarda principalmente lo sviluppo di cementi iniettabili osteointegrativi terapeutici ed allottimizzazione di compositi per restauro dentale.- Polimeri e compositi per la rigenerazione dei tessuti soffici. Le attività di ricerca riguarda la progettazione di materiali capaci di mimare le proprietà e funzioni di fluidi biologici e della matrice extracellulare di tessuti soffici. Inoltre, si intende sviluppare protesi di disco, di menisco e dispositivi endovascolari idonei al rilascio controllato di farmaci.-Preparazione e caratterizzazione di substrati per l'ingegneria dei tessuti connettivi. La ricerca riguarda la preparazione scaffolds biomimetici compositi con proprietà multifunzionali per la rigenerazione in vitro di tessuti omologhi quali i tessuti ossei, tendini, legamenti e menisco.-Nuove tecnologie per la realizzazione di scaffolds e nano strutture biofunzionali. Realizzazione di membrane polimeriche mediante tecnologia ad impronta molecolare, e sviluppo di tecnologie di progettazione mediante tecniche di imaging e prototipizzazione di strutture custom-made

Stato dell'arte

I biomateriali e i relativi sistemi protesici sviluppati negli anni '70 erano caratterizzati dal loro comportamento inerte con il tessuto circostante. Il successivo sviluppo di nuovi materiali e della modulazione della loro interazione con i sistemi biologici, ha permesso di sviluppare materiali con una elevata potenzialità ad interagire con il tessuto naturale, purtroppo la loro biofunzionalità è tuttora limitata. E' necessario quindi sviluppare materiali multi-funzionali seguendo nuovi approcci progettuali e nuove soluzioni di processo dei materiali, focalizzando la ricerca su materiali "bio-inspired". L'obiettivo primario quindi, consiste nello sviluppo di nuovi biomateriali intelligenti che posseggono superfici bioattive e funzioni terapeutiche capaci attivare cellule e geni specifici, per ottimizzare il processo di rigenerazione dei tessuti. La progettazione di nuovi costrutti in ingegneria tessutale deve quindi accoppiare le due proprietà per ottimizzare il processo biologico di proliferazione e differenziamento cellulare. L'applicazione di nuove tecnologie permette la realizzazione di substrati e nano-strutture per ottimizzare le proprietà dei tessuti omologhi.

Azioni

Attività da svolgere

Le attività di ricerca riguardano per la messa a punto di materiali in grado di sostituire parti del corpo umano con le stesse proprietà e funzioni specifiche, e incorporare sostanze (farmaci, fattori di crescita, etc.) da rilasciare con una cinetica programmata, e lo sviluppo di tecnologie di progettazione e di prototipizzazione rapida. Dai risultati preliminari ottenuti si evince la potenzialità delle strutture progettate di essere capaci di rigenerare tessuti naturali, pertanto le attività future riguardano principalmente di 'multifunzionare' tali strutture in modo di ottimizzare la rigenerazione e di iniziare l'applicazione in tessuti patologici. Inoltre, si intende passare alla fase di prototipizzazione caratterizzazione ed eventuale applicazione in vivo delle protesi di legamento disco e menisco per effettuare un eventuale trasferimento tecnologico.

Punti critici e azioni da svolgere

Le attività presentate sono ad elevato rischio per la molteplicità dei fattori e competenze coinvolte. Attualmente la conoscenza acquisita permette di identificare punti critici in quelle attività che riguarda l'interazione materiali e cellule per la ricostruzione di tessuti omologhi a causa della tridimensionalità di essi,



in particolare per quanto concerne la rigenerazione dei tessuti affetti da patologie. Lo sviluppo di nuove competenze e tecnologie strumentali in fase di acquisizione e programmate possono rendere fattibili molti punti critici.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

La progettazione e la realizzazione di biomateriali e nuovi sistemi protesici da parte dell'Istituto si è sempre basata sul concetto di "learning from nature" focalizzando la ricerca su materiali "bio-inspired" e compositi. Tale approccio attualmente riconosciuto a tutti i livelli scientifici, ha permesso di sviluppare competenze su struttura e funzionalità dei tessuti naturali, sintesi e preparazione di polimeri (naturali, sintetici, miscele) e compositi, caratterizzazione chimico-fisica meccanica e biologica, tecnologie avanzate di progettazione e preparazione di polimeri e compositi. Bioreattori sono utilizzati per mimare l'ambiente fisiologico (meccanico-chimico) per lo sviluppo di tessuti omologhi. Inoltre sono implementate tecnologie ad impronta molecolare, di progettazione partendo da tecniche di imaging fino alla prototipizzazione rapida permettendo di realizzare costrutti 3D custom made.

Collaborazioni (partner e committenti)

CRIB, Università di Napoli Federico II, Università di Trento, Università di Catania, Istituto Ortopedici Rizzoli, Politecnico di Milano, Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona (Spain), IRC in Biomedical Materials, Queen Mary University of London (U.K.), University of Cambridge(U.K.), ETH and University of Zurich, (Switzerland), University of Basel(Switzerland), University of Manchester(UK), University of Edinburgh(UK), University of Wien (Austria) University of Liverpool (UK), Department of Pathology, University Hospital of Cleveland (USA). Fidia Advanced Biopolymers s.r.l., Finceramica srl, Indaco S.p.A.

Finalità

Obiettivi

Sviluppo di materiali e strutture multi-funzionali per la riparazione e rigenerazione dei tessuti duri e soffici. Sviluppo di strutture per il rilascio controllato di farmaci e fattori di crescita. Definizione di processi tecnologici per la realizzazione di sistemi protesici. Modellazione, progettazione e tecnologie di preparazione avanzate di scaffold per la rigenerazione di tessuti duri e soffici. Ottimizzazione di tecniche di coltura cellulare e progettazione di bioreattori per la rigenerazione di tessuti.

Risultati attesi nell'anno

Definizione dei parametri chimico-fisico e biologici di materiali e strutture per la riparazione e rigenerazione dei tessuti. Sviluppo di tecnologie di preparazione, metodologie di preparazione di tessuti omologhi (bioreattori) e di prototipizzazione integrate a tecniche di analisi (TAC, RMI). Pubblicazioni e brevetti. I diversi risultati sono estremamente collegati e si può considerare uno sviluppo temporale in cinque anni.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Le attività di ricerca hanno condotto allo sviluppo di diversi sistemi protesici ed in alcuni casi alla realizzazione di diversi brevetti (6 nel periodo 2004-2005) di cui "Protesi e supporto per la sostituzione, riparazione, rigenerazione del menisco" in collaborazione con FAB (Progetto Europeo (Meniscus regeneration). Attualmente sono in corso contatti con diverse aziende per lo sviluppo di tali sistemi protesici

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

L'invecchiamento della popolazione nei paesi sviluppati ha permesso un notevole sviluppo dei biomateriali per applicazioni biomediche e relativo mercato. Associato al problema di invecchiamento esiste la persistenza di patologie che necessitano la ricostruzione dei tessuti naturali danneggiati pertanto, si richiede in continuità lo sviluppo di nuovi materiali e nuove tecnologie. La problematica è molto più evidente nei paesi sottosviluppati o in via di sviluppo dove sono utilizzate tecniche e materiali ormai superati. Pertanto per migliorare la qualità della vita di tale settore della popolazione diventa necessario incrementare le prestazioni dei materiali per sviluppare sistemi protesici e dispositivi medici con elevata affidabilità e biofunzionalità. Un altro parametro è l'ottimizzazione costo/efficacia del trattamento che attualmente è prioritario per tutte le organizzazioni sanitarie.

Moduli

Modulo: Biomateriali ed ingegneria dei tessuti
Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Biomateriali ed ingegneria dei tessuti
Istituto esecutore: Istituto per i materiali compositi e biomedici
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
377	0	235	0	612	1085	1320	89	N.D.	1786

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
6	7

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	1	1	0	0	0	0	8	10

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
3	4	2	9

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione mirata di Materiali Macromolecolari ad Architettura Controllata e/o Nanostrutturati per un Utilizzo Funzionale

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio delle macromolecole
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MARIA CARMELA SACCHI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Armanini Marco Gabriele	IV	Costa Giovanna	II	Peruzzini Maurizio	II
Barbaro Pierluigi	III	Damiani Stefania	VII	Pioli Franco	IV
Barbieri Paolo	VI	Dondero Giovanni	IV	Piovani Daniele	V
Bartoli Carlo	VI	Donzellini Simonetta	IV	Provasoli Augusto	II
Bergamini Natalina	V	Forlini Fabrizio	III	Provasoli Francesco	IV
Bertini Fabio	III	Giacometti Schieron	V	Pucci Valeria	VII
Biagiotti Francesco	VII	Alberto		Ragazzi Massimo	II
Bianchini Claudio	I	Giambastiani Giuliano	III	Rapallo Arnaldo	III
Boggioni Laura	III	Ienco Andrea	III	Ricci Giovanni	III
Boglia Aldo	IV	Italia Salvatore	V	Sacchi Maria Carmela	II
Bonaccini Marusca	IV	Izzo Mario	VII	Santarelli Massimo	VIII
Bonassi Palmira	IV	Masi Dante	IV	Stagnaro Paola	III
Cam Davy	VII	Meli Andrea	II	Striseo Marco	VII
Canetti Maurizio	IV	Mendichi Raniero	III	Tarchi Francesca	VII
Castoldi Elena	VII	Migliacci Fabio	IV	Trefiletti Vincenzo	IV
Cavazza Bianca Barbara	II	Moneti Simonetta	III	Tritto Incoronata	II
Cecconi Franco	IV	Oberhauser Werner	III	Zannoni Giulio	IV
		Passaglia Elisa	III		

Temi

Tematiche di ricerca

La ricerca si svolge attraverso i seguenti 5 moduli di attività corrispondenti alle principali tematiche di ricerca: 1. Sintesi e sviluppo di nuovi catalizzatori "single site" metallocenici e post-metallocenici (ISMAC - Milano, ICCOM - Firenze/Pisa); 2. Sintesi di omopolimeri, copolimeri e terpolimeri da olefine lineari, ramificate, cicliche e diolefine ad architettura controllata (ISMAC - Milano); 3. Progettazione e sviluppo di ibridi nanostrutturati (ISMAC - Milano/Genova, ICCOM - Firenze/Pisa); 4. Sviluppo di materiali multicomponenti e/o nanocompositi a base di polimeri sintetici per applicazioni specifiche (ISMAC - Milano/Genova, ICCOM - Firenze/Pisa, ICTP - Napoli); 5. Studio delle correlazioni struttura-proprietà e modellistica molecolare delle nuove formulazioni polimeriche (ISMAC - Milano/Genova).

Stato dell'arte

Nessuna classe di materiali può competere coi polimeri in termini di ampiezza di proprietà, numero di applicazioni, flessibilità nella lavorazione e potenziale basso costo. L'industria mondiale utilizza circa 180 milioni di tonnellate di materiali polimerici all'anno, di cui oltre il 60% è costituito da poliolefine prodotte con catalizzatori a base di metalli di transizione. Questi materiali sono inoltre poco inquinanti e facilmente riciclabili. L'evoluzione del mercato chiede tuttavia un ulteriore salto di qualità, ponendo una crescente domanda di materiali sempre più diversificati, in grado di rispondere a esigenze specifiche o di fornire prestazioni sempre più avanzate, che offrano prospettive di allargare le applicazioni da strutturali di largo consumo ad 'ingegneristiche'. Le recenti scoperte nel campo della catalisi 'single site' per la polimerizzazione delle olefine, unitamente allo sviluppo delle nanotecnologie, aprono la via alla possibilità di allargare grandemente la gamma di proprietà potenzialmente ottenibili in un sistema polimerico consentendone un amplissimo spettro di possibili applicazioni.



Azioni

Attività da svolgere

Le attività della commessa si svolgeranno all'interno delle tematiche dei cinque moduli di attività: 1. Sintesi e sviluppo di nuovi catalizzatori "single site" metallocenici e post-metallocenici (ISMAC - Milano, ICCOM - Firenze/Pisa); 2. Sintesi di omopolimeri, copolimeri e terpolimeri da olefine lineari, ramificate, cicliche e diolefine ad architettura controllata (ISMAC - Milano); 3. Progettazione e sviluppo di ibridi nanostrutturati (ISMAC - Milano/Genova, ICCOM - Firenze/Pisa); 4. Sviluppo di materiali multicomponenti e/o nanocompositi a base di polimeri sintetici per applicazioni specifiche (ISMAC - Milano/Genova, ICCOM - Firenze/Pisa, ICTP - Napoli); 5. Studio delle correlazioni struttura-proprietà e modellistica molecolare delle nuove formulazioni polimeriche (ISMAC - Milano/Genova).

Punti critici e azioni da svolgere

I punti critici non riguardano l'aspetto scientifico: le riconosciute competenze della Commessa permettono di individuare e superare le difficoltà e, dove fosse ritenuto necessario, di riindirizzare la ricerca. Il principale punto critico deriva dal ridotto inserimento di giovani ricercatori, di cui l'istituzione di borse di studio per neolaureati su fondi CNR potrebbe essere solo una parziale soluzione. Perché la ricerca abbia stabilità ed i progetti ampio respiro è necessario che in ogni gruppo di ricerca siano presenti giovani strutturati o con la prospettiva di diventarlo, non solo borsisti e assegnisti senza prospettive di assunzione. Altro punto critico l'insufficienza di fondi ordinari che costringe i ricercatori ad una frenetica attività di reperimento di finanziamenti, con progressiva riduzione del tempo disponibile per attività di ricerca. Tutto questo porterà inevitabilmente ad una riduzione dei risultati scientifici. Va inoltre sottolineato che la gran parte dei fondi derivanti da finanziamenti esterni viene investita in assegni di ricerca piuttosto che nelle indispensabili spese di ammodernamento e/o acquisto di strumenti e apparecchiature.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Competenze/tecnologie dedicate:- sintesi organiche e metallorganiche- design e sviluppo di catalizzatori per la omo e copolimerizzazione - sintesi di omo e copolimeri con catalizzatori a base di metalli di transizione - caratterizzazione microstrutturale di omo e copolimeri- studio dei meccanismi di polimerizzazione- preparazione di compositi e nanocompositi- funzionalizzazione di poliolefine- caratterizzazione termica, reologica, meccanica, e morfologica dei materiali- sviluppo di metodi di analisi di immagine, analisi termomeccanica e dello stato solido- correlazione tra caratteristiche microstrutturali, molecolari, chimico-fisiche e morfologiche dei nuovi polimeri e dei nuovi materiali - ottimizzazione del processing (estrusione, filatura, stampaggio) di poliolefine con e senza nanocariche- modellistica molecolare (dinamica molecolare, metodi Montecarlo, meccanica statistica di polimeri) orientata alla comprensione/previsione della relazione struttura molecolare/proprietà finali del materiale - modellistica molecolare (calcoli ab initio) dei catalizzatori e delle interazioni catalizzatore-substrato e delle proprietà polimeriche

Collaborazioni (partner e committenti)

Partners di Progetti Europei: 1. Strategic Targeted Research Projects 'Designed Nanostructured Hybrid Polymers: Polymerization Catalysis and Tecton Assembly' (NANOHYBRID)(UE FP6-Priorità 3); 2. FSE Regione Lombardia 'Materiali poliolefinici ad alta riciclabilità per imballaggio alimentare e farmaceutico-biomedicale'; 3. Network of Excellence 'Integrated Design of catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production'(IDECAT) (UE FP6-Priorità 3); 4. UE Progetto LIFE Environment. Partners di Progetti MIUR: FIRB RBNE03R78E_005 'Nuovi materiali e film polimerici nanostrutturati a ridotto impatto ambientale, con proprietà di risposta verso agenti chimici e fisici, per il packaging flessibile. (NANOPACK)' Partners industriali: 1. BASELL-FE; 2. TICONA-GmbH(D); 3. ITP Ind. Termoplastica Pavese-PV; 4. Novamont-NO; 5. Polyeur-BN; 6. Pirelli-MI; 7. Elasis-NA; 8. Solvay Solexis; 9. Fidia Pharmaceuticals. Altri partners: Università di Milano, Genova, Firenze, Pavia, Pisa, Torino, Palermo, Polymer Institute Slovak Academy of Sciences.

Finalità

Obiettivi

1. Formulazione di nuovi catalizzatori e/o processi catalitici finalizzati alla sintesi di nuove architetture macromolecolari; 2. Sviluppo di nuovi materiali a base polimerica per imballaggio, dispositivi ottici ed elastomeri; 3. Compositi e nanocompositi a matrice poliolefinica, eventualmente modificata; 4. Ibridi termoplastici ad alta barriera, alta stabilità dimensionale e migliore termoconduttività e termoresistenza; 5. Sviluppo di 'nuovi' materiali poliolefinici con prestazioni ottimizzate mediante miscelazione di polimeri commerciali e/o nanocariche; 6. Ottimizzazione dei parametri di processo per la produzione di film flessibili e manufatti polimerici in generale; 7. Sviluppo di metodologie di caratterizzazione e metodi teorici per lo studio di proprietà dei polimeri.



Risultati attesi nell'anno

1. Catalizzatori mono- e bimetallici anche nanostrutturati per la sintesi di polimeri di olefine, cicloolefine e diolefine a struttura controllata; 2. Omo- copolimeri a base olefinica con comonomeri non tradizionali per applicazioni in settori specifici; 3. Copolimeri random e a blocchi di olefine con monomeri polari per nanoibridi polimerici stabilizzati da legami chimici; 4. Omopolimeri a blocchi cristallino/amorfo, polimeri a ramificazione controllata quali matrici polimeriche per compositi e nanocompositi; 5. Compositi e nanocompositi a matrice termoplastica o elastomerica, ottenuti mediante additivazione di micro- o nanocariche al polimero anche con tecniche di compatibilizzazione in situ; 6. Micro- e nanoparticelle funzionalizzate disperdibili in matrici termoplastiche; 7. Metodologie di caratterizzazione ed ottimizzazione dei parametri di processo per la produzione di film e manufatti polimerici in generale; 8. Tecniche computazionali finalizzate a: i) raccolta di statistiche conformazionali per polimeri in soluzione e fuso; ii) implementazione di teorie diffusive per la modellizzazione del solvente; iii) metodi di ottimizzazione globale.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

I moderni catalizzatori per la polimerizzazione delle olefine hanno una enorme potenzialità di sintesi di strutture molecolari più complesse e diversificate rispetto a quelle attualmente presenti sul mercato ed offrono la possibilità di allargare le applicazioni da strutturali di largo consumo ad 'ingegneristiche'. Il loro sviluppo permetterà di utilizzare processi di produzione semplificati ed economicamente più convenienti. Il progetto ha come obiettivo anche l'ottimizzazione dei parametri di processo in base alle proprietà del polimero al fine di una maggiore produttività.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

E' noto che le poliolefine sono la famiglia di polimeri di massa meno inquinanti in assoluto. Oltre ad essere facilmente riprocessate e riutilizzate, le poliolefine sono prodotte in processi catalitici estremamente efficienti e praticamente senza sottoprodotti. I nuovi materiali a base poliolefinica a struttura controllata, con ampia gamma di funzionalità che il progetto si propone di sviluppare potranno sostituire a breve-medio termine materiali plastici meno compatibili con la salute e con l'ambiente, oltre che più costosi, fornendo migliori prestazioni.

Moduli

Modulo: Progettazione mirata di Materiali Macromolecolari ad Architettura Controllata e/o Nanostrutturati per un Utilizzo Funzionale
Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Progettazione mirata di Materiali Macromolecolari ad Architettura Controllata e/o Nanostrutturati per un Utilizzo Funzionale
Istituto esecutore: Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Progettazione mirata di Materiali Macromolecolari ad Architettura Controllata e/o Nanostrutturati per un Utilizzo Funzionale
Istituto esecutore: Istituto per lo studio delle macromolecole
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
1491	824	564	64	2943	151	1539	445	N.D.	3539

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
16	30

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	2	0	11	0	0	0	0	0	13

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	9	19	28

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Nuovi metodi per lo sviluppo e la caratterizzazione di materiali polimerici ottenuti con sintesi non convenzionali

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Sede principale svolgimento:	Sezione di Ferrara
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MARCO SCOPONI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Ballestri Marco	V	Gazzano Massimo	III	Scoponi Marco	III
Bragaglia Giovanni	V	Manderioli Anita	IV	Tondelli Luisa	III
Comelli Fabio	II	Ottani Stefano	III		
Favaretto Silvano	V	Pizzuto Giuliano	V		
		Roda Silvana	IV		

Temi

Tematiche di ricerca

Esperimenti di adsorbimento/rilascio di biomolecole su nano/microsfere polimeriche e valutazioni comparative in vitro e in vivo; Cinetiche di polimerizzazione termo- e foto-iniziata; Caratterizzazione dinamico-meccanica, spettroscopica e reologica di polimeri termoplastici e foto-(termo)indurenti; Studio delle proprietà termiche e correlazioni proprietà-struttura di materiali polimerici semicristallini e loro miscele; Studio delle interazioni molecolari di polietilenglicoli in funzione del peso molecolare; Sintesi di polimeri biocompatibili per la crescita di cellule endoteliali, muscolari e di osteoblasti;

Stato dell'arte

Lo studio di nuove metodologie di polimerizzazione e l'applicazione di metodi di caratterizzazione avanzati ha permesso lo sviluppo di materiali polimerici per usi speciali. La fotopolimerizzazione di monomeri multiacrilici e diepossidici trova largo impiego per la preparazione di rivestimenti polimerici per superfici metalliche e di film termoplastici senza utilizzare solventi (vernici, adesivi e inchiostri). Inoltre questo metodo di polimerizzazione è anche utilizzato per la sintesi di materiali polimerici interpenetrati per usi speciali, per es. contenenti composti con proprietà liquido-cristalline, luminescenti e nanocompositi. La sintesi e caratterizzazione di polimeri biodegradabili e le loro miscele con polimeri derivanti da fonti rinnovabili ha potenziali impieghi come film per l'imballaggio alimentare, poiché riducono l'impatto ambientale e favoriscono il riciclo a fine vita, e in campo biomedico per l'ingegneri dei tessuti. La funzionalizzazione di superfici polimeriche con biomolecole è usata con successo per il rilascio graduato di farmaci. La veicolazione di farmaci con nanosfere polimeriche riduce la quantità del farmaco prolungando l'effetto terapeutico.

Azioni

Attività da svolgere

L'attività riguarderà le seguenti ricerche su: a) la veicolazione di biomolecole con nano/microsfere polimeriche con ridotta penetrazione intracellulare mediante nano/microsfere polimeriche funzionali; b) la determinazione delle cinetiche di polimerizzazione foto-iniziate con miscele di monomeri/oligomeri multiacrilici per la sintesi di polimeri per usi speciali; c) la caratterizzazione meccanica, dinamico-meccanica, reologica e termica di resine epossidiche e di cianamidi per la produzione di compositi contenenti fibre di carbonio e di materiali polimerici ottenuti per fotopolimerizzazione; d) la preparazione di idrogeli termosensibili e di matrici polimeriche per la crescita cellulare a base di polifosfati con polilattidi o poliglicolidi; e) la caratterizzazione dinamico-meccanica e termica di miscele polimeriche biodegradabili e biocompatibili; f) la determinazione delle proprietà termodinamiche di poliglicoli in soluzione; g) l'indagine morfologica/strutturale mediante analisi termica e diffrazione di raggi X ad alto e basso angolo di nuovi copolimeri disintesi, di leghe polimeriche, di biopolimeri e di biocompositi a matrice polimerica contenenti fosfati di calcio.



Punti critici e azioni da svolgere

Ottimizzazione degli esperimenti di adsorbimento/desorbimento di biomolecole modello per la validazione di differenti preparazioni di campioni di nano/microsfere già selezionati per gli studi in vitro ed in vivo; Messa a punto dell'apparecchiatura per l'elettrospinning di materiali polimerici; I costi di gestione per la ricerca e il personale non consentono un finanziamento adeguato al mantenimento della ricerca e al trasferimento tecnologico. Tutte le altre attività in corso hanno una fattibilità solo sul medio termine assicurata sia da collaborazioni consolidate costituzioni di ricerca italiane e straniere e da entrate esterne.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Modifica chimica di monomeri acrilici e stirenici per la sintesi di copolimeri per usi speciali; Polimerizzazione radicalica indotta da radiazione UV-Vis con monomeri/oligomeri multiacrilici e diepossidici; Caratterizzazione chimico-fisica di macromolecole in soluzione; Caratterizzazione strutturale di polimeri e di miscele contenenti materiali polimerici semicristallini; Caratterizzazione reologica e fotoreometria; Metodi computazionali per la modellazione molecolare; Veicolazione di farmaci con nanosfere polimeriche biocompatibili; Modifica chimica e reazioni di polimerizzazione con radiazioni ionizzanti. Microscopia ottica e elettronica; Caratterizzazione FTIR, FTNIR, ¹H e ¹³C NMR; Diffrattometri raggi X singolo cristallo e polveri; Reometro rotazionale oscillante; Fotoreometria di miscele fotopolimerizzabili; Analizzatore dinamico-meccanico; Proprietà ottiche; Prove meccaniche; Impianto pilota di fotopolimerizzazione per trasferimento tecnologico; Spettroscopia di correlazione fotonica; Tecniche Cromatografiche; Analisi termica e fotocalorimetria; Dispositivi per invecchiamento accelerato (termo- e foto-ossidazione).

Collaborazioni (partner e committenti)

Centro di Biotecnologie 'Carlo Bo' Università degli Studi di Urbino; Laboratorio di Virologia Istituto Superiore di Sanità Roma; Università del Piemonte Orientale sede di Alessandria; Dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell'Università di Padova; Dipartimento di Neurofisiologia dell'Università di Campinas (Brasile); European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (France); Dipartimento di Ingegneria dei Materiali Università di Ancona; Dipartimento di Chimica Università di Salerno; Dipartimento di Microbiologia Università degli Studi di Ferrara; Istituto di Chimica Biologica Università degli Studi di Urbino; German Research Centre for Biotechnology (GBF) Braunschweig Germania; Solvay-Benvic S.p.A. Ferrara; Basell SpA - Centro Ricerche 'G Natta' Ferrara; Enia Spa - Reggio Emilia; Reglass SpA, Minerbio (Bo); Priapas SpA - Sona (Vr); Dipartimento di Chimica Università di Ferrara; Dipartimento di Ingegneria Università di Ferrara; Dip.to di Chimica Applicata e Scienza dei Materiali Università di Bologna; ICTP-CNR, Catania.

Finalità

Obiettivi

Caratterizzazione chimico-fisica di nano/microsfere polimeriche con tecniche spettrofotometriche, elettroforetiche e di diffusione dinamica con luce laser (PCS, ZP); Caratterizzazione dinamico-meccanica (DMTA), termica (DSC, TGA) di materiali polimerici; Cinetiche di polimerizzazione con tecniche come la fotoDSC, FTIR in temporeale di miscele fotopolimerizzabili; Comportamento reologico di materiali polimerici termoplastici termo-(foto)indurenti; Ottenimento di fibre o di film polimerici per la semina di linee cellulari; Proprietà termodinamiche di soluzioni polimeriche; Caratterizzazione strutturale con WAXS a SAXS di materiali polimerici semicristallini; Analisi morfologica con microscopio elettronico a scansione.

Risultati attesi nell'anno

Saranno svolte attività di ricerca sia di tipo fondamentale che applicate alla caratterizzazione avanzata dei materiali polimerici industriali. In particolare sono attesi risultati su: a) le correlazioni proprietà struttura di polimeri semicristallini; b) la sintesi di polimeri fotoreticolati per la produzione di vernici, adesivi e inchiostri e relativo trasferimento tecnologico; c) l'ottimizzazione di matrici polimeriche per la crescita cellulare; d) le nuove metodologie di sintesi e di caratterizzazione su materiali polimerici in fase solida e in soluzione; e) l'identificazione dei parametri sperimentali per la correlazione delle interazioni polimero-solventi; f) la funzionalizzazione superficiale di nano/microsfere polimeriche specificatamente progettate per la veicolazione di acidi nucleici e proteine; g) pubblicazioni scientifiche; h) comunicazioni a congressi nazionali e internazionali; i) organizzazione di seminari, convegni nazionali su tematiche riguardanti la sintesi e la caratterizzazione dei materiali polimerici.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

rivestimenti polimerici (coatings), nanocompositi, sviluppo precompetitivo di materiali industriali modificati, film per imballaggio alimentare.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

nuovi sistemi di delivery di farmaci e/o vaccini, farmaci a lento rilascio, biopolimeri, polimeri per la crescita cellulare.



Moduli

Modulo: Nuovi metodi per lo sviluppo e la caratterizzazione di materiali polimerici ottenuti con sintesi non convenzionali

Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Ferrara

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
395	109	74	0	578	19	202	84	N.D.	681

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
5	8

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	2	2	0	0	0	0	0	4

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	1	2	4

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sintesi di nuove membrane artificiali anche con proprietà catalitiche proprietà di trasporto, separazioni molecolari

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la tecnologia delle membrane
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ENRICO DRIOLI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Algieri Catia	III	De Bartolo Loredana	III	Jansen Johannes Carolus	III
Apa Iolanda	VII	De Luca Giorgio	III	Liberti Maria Annunziata	VI
Barbieri Giuseppe	III	Donato Laura	III	Morelli Sabrina	III
Basile Angelo Bruno	III	Figoli Alberto	III	Nigri Anna	VII
Cassano Alfredo	III	Giorno Lidietta	III	Tasselli Franco	III
Chiappetta Giovanni	VI	Gordano Amalia	III	Tavolaro Adalgisa	III
Clarizia Gabriele	III	Gugliuzza Anna Rosa	III	Tocci Elena	III
Criscuoli Alessandra	III				

Temi

Tematiche di ricerca

Tra le principali attività da svolgere vi sono quelle previste dai progetti di ricerca finanziati dall'EU, dal MIUR, da gruppi privati, etc. Queste attività riguardano gli ulteriori sviluppi delle attività in corso al fine di migliorare le proprietà di trasporto dei componenti di interesse e, per le membrane catalitiche, anche le proprietà di reattività e selettività verso i prodotti di reazione desiderati. Essi prevedono: la preparazione di nuove membrane artificiali, di natura polimerica, inorganica e metallica, eventualmente con proprietà catalitiche, per separazioni molecolari, oltre allo studio delle loro proprietà di trasporto. Un campo di indagine specifico è quello riguardante la eterogeneizzazione di catalizzatori in membrane catalitiche. Ulteriori settori di ricerca riguardano lo studio e lo sviluppo di reattori catalitici a membrana, e di contattori a membrana (quali gli emulsificatori, i cristallizzatori, etc.) Parte integrante delle tematiche risultano essere le tecniche di dinamica molecolare e la quanto-meccanica nella simulazione e modellizzazione dei meccanismi di trasporto e delle operazioni a membrana.

Stato dell'arte

A livello globale, le membrane rivestono già un interesse significativo che via via sta crescendo sia a livello della grande industria che di quella farmaceutica, della chimica fine e di base. Le operazioni a membrana, infatti, risultano oggi una delle più interessanti risposte alla strategia della intensificazione dei processi (process intensification) in pratica in tutti i sistemi produttivi. In alcuni settori, come la dissalazione di acque saline o salmastre, la produzione di azoto per via non-criogenica, il trattamento dei sieri nell'industria lattiero-casearia, etc., alcuni processi di separazione a membrana (RO, MF, UF, NF) sono già oggi una tecnologia dominante. In altri settori quali quello del catalyst design e della reattoristica chimica, o del trasferimento tra fasi, interessanti ricerche sono in corso e verranno sviluppate sempre più nei prossimi anni sia a livello accademico che industriale, come ben documentato a livello internazionale.

Azioni

Attività da svolgere

Studi di base. Fenomeni di trasporto all'origine delle selettività in membrane polimeriche ed ibride. Impiego delle tecniche di dinamica molecolare e meccanica quantistica per prevedere le permselettività (EU-FP6 - "MultiMatDesign"). Modellazione di operazioni a membrana. Sviluppo di Membrane. Membrane polimeriche ed inorganiche, con diverse proprietà di trasporto in configurazione piana e di fibre capillari. (Progetto MIUR-Decreto 9/10/02 "Ottimo"). Inoltre, si studieranno membrane catalitiche per ossidazioni selettive e reazioni di solfossidazione, ottenute eterogeneizzando diversi catalizzatori. Progetto MIUR-FIRB "CAMERE - RBNE03JCR5". Reattori catalitici a membrana per reazioni per produzione, up-grading e purificazione di idrogeno. Progetti: EU-FP6 "Hydrofueller" e MIUR-FIRB. Membrane Contactors: per dissalazione di acque e cristallizzazione di sali e di proteine. Si prepareranno emulsioni usando proteine con proprietà catalitiche.



(Progetto MIUR-Decreto 9/10/02 "Ottimo") Processi a membrana, quali MF, UF, NF, RO e pervaporazione da impiegare, anche integrati tra loro, nel trattamento di succhi alimentari, per diverse separazioni gassose.

Punti critici e azioni da svolgere

Non sono previsti punti critici se non quelli legati all'acquisizione di strumentazione specifica (per es., SEM, TEM, GC). Tra le azioni da svolgere vi sono quelle legate a nuove collaborazioni con nuove unità operative aventi specifiche competenze di interfaccia e conoscenza specifica per es. Politecnico di Torino, Università di Padova, Università di Salerno, Università di Milano, Kema (Olanda), GVS (Bologna), etc. LITM è coinvolto in progetti di ricerca nazionali ed internazionali, per es., NanoGloWA (EU-FP6); "Integrazione di nuove tecnologie basate su operazioni avanzate a membrana nelle macchine e nei sistemi di produzione" Bando MIUR "Laboratorio Pubblico-privato".

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le attività di ricerca in tale ambito richiedono competenze interdisciplinari che spaziano dalla sintesi chimica, alla preparazione e caratterizzazione di materiali funzionali, all'ingegneria delle membrane e delle operazioni a membrana. Vengono utilizzate tecniche di caratterizzazione analitica quali spettroscopia UV-Vis, FT-IR, tecniche di spettrometria di massa e di cromatografia GC, HPLC, etc. Misure di permeabilità a singoli gas e miscele di gas. Studi teorici sono utilizzati per la comprensione e previsione dei fenomeni di trasporto in membrane, per mezzo di simulazioni molecolari di Dinamica Molecolare, e per mezzo di modelli di trasporto di materia.

Collaborazioni (partner e committenti)

Aziende GVS S.p.A., P&G, ENEA (Roma) UK : Chart Heat Exchanger Ltd, Dytech corporation Ltd , Air Products Plc, Molecular Simulations Ltd. FRANCE: CEA Grenoble, l'Air Liquide S.A. GERMANY: GKSS, LSMW GmbH NORWAY : Sintef (Oslo e Trondheim) DK: Union Engineering AS BELGIUM: Vito Università ed Istituti di ricerca Università: della Calabria (CS), di Bari, di Messina, di Roma "La Sapienza", di Napoli University: of Zaragoza (SPAIN), of Warwick (UK), of Liege (BELGIUM), of Ulster (UK), of Twente (NL), of Fés (MOROCCO) Kungliga Tekniska U. (SWEDEN), Texas Univ. at Austin (USA), Hanyang Univ. (KOREA), Technical Univ. of Denmark (DK) Imperial College (UK) IBET (PORTUGAL) "Demokritos" (GREECE) Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek (BELGIUM) Inst. of Chem. Techn. Prague (CZECH REPUBLIC) EPA (Environ. Protection Agency, USA) Nation. Research Centre Phys. Sci. (GREECE) Inst. of Phys. Chem. (GREECE) Chinese Academy of Sci. (CHINA) Citrus Res. Institute of CAAS (CHINA) National Res. Center (EGYPT) National Inst. Mater. Chem. Res. (JAPAN) KRICT (SOUTH KOREA) Inst. of Petrochemical Synthe

Finalità

Obiettivi

I principali obiettivi riguardano il design di nuove membrane e sistemi a membrana per separazioni in fase gassosa e liquida. Realizzazione di nuove membrane polimeriche, inorganiche ed ibride per separazione molecolare con caratteristiche di resistenza chimica ed alla temperatura, di selettività e di permeabilità, superiori a quelle oggi esistenti, e per applicazioni in settori industriali quali l'industria petrolchimica, le reazioni in fase gassosa ad elevate temperature, etc. Sviluppo di nuove membrane microporose fortemente idrofobiche da impiegarsi quali contattori a membrana. Preparazione, caratterizzazione e testing di membrane con proprietà di trasporto e proprietà catalitiche. Studio di sistemi integrati a membrana per produzione di idrogeno: produzione, purificazione e separazione di H₂ per fuel cell. Studio di MEMS e OLED a membrana in microelettronica, etc. Nuovi processi a membrana integrati per il trattamento delle acque, nella dissalazione, nell'industria agroalimentare, etc..

Risultati attesi nell'anno

Preparazione di nuove membrane polimeriche ed inorganiche con specifiche caratteristiche di trasporto e proprietà chimico-fisiche. Membrane catalitiche (con catalizzatori a base di poliossometallati e complessi metallici di titanio e vanadio, con porfirine, con azidi) per ossidazioni selettive. Previsione delle proprietà di trasporto di sistemi densi (copolimeri di polieteri e poliammidi), micro e meso porosi con metodologie teoriche. Reattori catalitici a membrana per produzione, l'up-grading e la purificazione di idrogeno. Dissalazione di acque e simultanea cristallizzazione di sali. Cristallizzazione di nuove forme metallo-proteine sia in condizioni statiche che dinamiche in 'membrane crystallizers'. Preparazione di emulsioni usando proteine con proprietà catalitiche. Impiego di processi a membrana integrati per il trattamento di succhi alimentari (kiwi), di nuovi prodotti ad alto valore aggiunto, per la dissalazione delle acque e per separazione di gas.

Potenziale impiego

-per processi produttivi

Processi separativi a membrana (utilizzanti cristallizzazioni a membrana, emulsificatori a membrana, contattori a membrana, separatori gassosi a membrana, reattori catalitici a membrana, etc.) di miscele di gas



e di gas e vapori, di miscele liquide anche in presenza di azeotropi, per il trattamento delle acque, per applicazioni nei settori della microelettronica, per produzione di idrogeno da reforming di idrocarburi, etc.
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

La scienza e tecnologia delle membrane, oggi riconosciuta come una "dominant technology" in molti campi della moderna industria, si prefigge, tra l'altro, lo sviluppo di nuovi processi e prodotti nell'ottica della strategia dell'intensificazione di processo, la migliore risposta oggi disponibile per una crescita sostenibile. Lo sviluppo di nuovi processi a membrana (contattori) per ridurre l'impatto ambientale e mitigare le emissioni di CO2 costituisce uno dei numerosi esempi.

Moduli

Modulo: Sintesi di nuove membrane artificiali anche con proprietà catalitiche
proprietà di trasporto, separazioni molecolari

Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
767	44	682	0	1493	609	1335	163	N.D.	2265

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
16	20

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
5	8	2	1	0	0	0	7	16	39

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	12	16	29

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Membrane in organi artificiali e biotecnologie.

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la tecnologia delle membrane
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ENRICO DRIOLI

Elenco dei partecipanti

liv.

liv.

liv.

Temi

Tematiche di ricerca

Funzionalizzazione di superfici di membrane per migliorarne la biocompatibilità e bioaffinità; Realizzazione di membrane caricate con cellule o macromolecole biologiche ad attività catalitica; Sviluppo di bioreattori a membrana in campo biomedicale (operanti come organi bioartificiali in vitro) e biotecnologico per la produzione di sostanze ad alto valore aggiunto (quali farmaci, nutraceuticals) e nuove formulazioni; Medicina e biologia rigenerativa.

Stato dell'arte

In letteratura sono riportati studi sulla coltura di epatociti e sulle loro funzioni metaboliche per un periodo di pochi giorni. I risultati ottenuti nel corso delle attività svolte hanno consentito di monitorare le funzioni cellulari fino a due settimane. Inoltre, il bioreattore a miscelazione completa ha consentito di poter ottenere dati cinetici in vitro della biotrasformazione di farmaci ad opera di cellule vitali. I risultati ottenuti nell'ambito dell'utilizzo di enzimi immobilizzati hanno mostrato che è possibile aumentare la stabilità catalitica di enzimi immobilizzati preservandone l'attività e la enantioselettività native. Al contrario di quanto generalmente osservato che gli enzimi immobilizzati aumentano al stabilità a danno dell'attività catalitica.

Azioni

Attività da svolgere

Sviluppo di membrane e sistemi a membrana adoperanti cellule e/o macromolecole di natura biologica. In particolare, l'attività riguarderà la preparazione di nuove membrane modificate superficialmente per migliorare l'adesione e le funzioni cellulari; lo sviluppo di bioreattori a membrana piana e/o tubolare adoperanti cellule umane (per es. epatociti) funzionanti come sistemi tissutali o organi bioartificiali in vitro; preparazione di microemulsioni (per applicazioni biomedicali e farmaceutiche) mediante emulsificatori a membrana; lo sviluppo e l'impiego di membrane caricate con enzimi o cellule in bioreattori per la produzione di specie enantiomeriche otticamente pure; l'utilizzo di nuovi sistemi multifasici a membrana integrando emulsificatori con bioreattori a membrana. Lo sviluppo e l'impiego di membrane per bioseparazioni da brodi di fermentazione, estratti vegetali, fluidi biologici. Sviluppo di nuovi sistemi a membrana per high throughput in proteomica e genomica. Nuove formulazioni per la preparazione e l'analisi di complessi bioartificiali a membrana di interesse nei settori di biologia e medicina rigenerativa.

Punti critici e azioni da svolgere

Non sono previsti punti critici se non quelli legati all'acquisizione di strumentazione specifica. Tra le azioni da svolgere vi sono quelle legate a collaborazioni con nuove unità operative aventi specifiche competenze di interfaccia e conoscenza nei settori multidisciplinari di interesse per lo sviluppo delle ricerche in oggetto.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Tra le principali competenze per lo sviluppo delle ricerche indicate vi sono: competenze in membrane e bioreattori a membrana; biologia, ingegneria biochimica e biomedicale; fenomeni di trasporto attraverso membrane; colture di cellule animali; caratterizzazione di superfici di membrane mediante misure di tensione superficiale, microscopia a forza atomica; analisi delle funzioni metaboliche di cellule animali; analisi quantitativa di biotrasformazioni di farmaci mediante HPLC. Purificazione ed immunolocalizzazione di proteine.



Collaborazioni (partner e committenti)

Università di Bari – Dipartimento di Chimica
Università di Napoli “Federico II” – Dipartimento di Patologia Sistemica
LSMW GmbH Total Life Science Solutions, (Berlin, GERMANY)
Inst University of Leipzig, BBZ—Cell Technology and Applied Stem Cell Biology (Leipzig, GERMANY)
University Ramon Llull of Barcelona - Institut Quimic de Saria (Barcelona, SPAIN)
Istuto de Biologia Experimental e Tecnologica (Oeiras, PORTUGAL)
Research Institute of Chemical Technology (KRICT) (Daejeon, SOUTH KOREA)

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale è quello di sviluppare sistemi bioartificiali avanzati risultanti dalla combinazione di proprietà selettive di componenti biologiche (cellule, enzimi, ecc.) con le proprietà strutturali e modulari di sistemi a membrana artificiali. Tali sistemi bioartificiali “custodiscono” il materiale biologico in complessi nano- e micro-strutturati che ottimizzano, tra gli altri, la distribuzione, il trasporto e le proprietà funzionali di cellule e macromolecole e consentono il controllo e mantenimento delle condizioni “vitali” a medio e lungo termine. Tra gli obiettivi principali per lo sviluppo di sistemi bioartificiali vi sono la realizzazione di organi bioartificiali; bioreattori a membrana per l'analisi cinetica di biotrasformazioni di farmaci operate da cellule vitali, biotrasformazioni operate da cellule o macromolecole per produzione di molecole ad alto valore aggiunto.

Risultati attesi nell'anno

Anno 2006- Realizzazione di bioreattori a membrana piana per analisi dell'efficienza di cellule epatiche con farmaci e mediatori della risposta infiammatoria.- Realizzazione di bioreattori a fibra cava caricate con cellule epatiche.- Formulazione di emulsioni O/W per somministrazione di farmaci liposolubili.- Realizzazione di sistemi di reazioni multifasiche stabili mediante emulsificatori a membrana.- Purificazione, anche mediante cristallizzazione a membrana, di proteine da estratti vegetali (glucosidasi da olivo).

Potenziale impiego

-per processi produttivi

Sistemi epatici bioartificiali operanti in vitro per la determinazione preliminare dell'effetto di farmaci sulle funzioni metaboliche del fegato. Reattori biocatalitici a membrana per la produzione di molecole di chimica fine ad alto valore aggiunto, quali farmaci otticamente puri, nutraceuticals.

-per risposte a bisogni individuali e collettivi

Lo screening dell'effetto di farmaci in sistemi in vitro potrebbe notevolmente facilitare la verifica preliminare di nuove molecole, limitando, almeno nella fase iniziale, l'impiego di cavie. Inoltre, potrebbero fornire dei sistemi per la verifica della risposta individuale a diversi farmaci. Lo sviluppo di sistemi biocatalitici selettivi ed efficienti in termini di produzione su larga scala consentirebbe di produrre molecole ad attività biologica altamente pure, a bassi costi e con minimizzazione di sottoprodotti.

Moduli

Modulo: Membrane in organi artificiali e biotecnologie.
Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
0	0	265	0	265	245	510	69	N.D.	579

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
16	20

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
1	2	1	1	0	0	1	2	3	16

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	5	1	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sviluppo e caratterizzazione di materiali polimerici biocompatibili e/o biodegradabili di origine sintetica e naturale

Dati generali

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri
Sede principale svolgimento:	Sezione di Catania
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	CONCETTO PUGLISI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Carà Michele	IV	Mineo Placido Giuseppe	VI	Samperi Filippo	III
Carroccio Sabrina Carola	III	Montaudo Maurizio	III	Santagati Ferdinando	VIII
Cozzolino Rosaria	III	Pastorelli Gaetano	VII	Spina Emanuela Teresa	III
De Pasquale Angela	V	Puglisi Concetto	I	Agata	
Garozzo Domenico	II	Rapisardi Roberto	V	Sturiale Luisella	III
Giuffrida Mario	III	Rizzarelli Paola	III	Vitale Maria Serenella	V
Impallomeni Giuseppe	III	Romeo Donata Agata	III	Vitalini Daniele	II
Messina Rosario	V			Zampino Daniela Clotilde	III

Tem

Tematiche di ricerca

Sviluppo caratterizzazione di materiali polimerici multicomponente a base di poliesteri, poliammidi e policarbonati mediante processi di miscelazione reattiva applicazioni nei settori agroalimentare e biomedicale. Studio della stabilità agli agenti ambientali (foto, termo e biodegradazione) e della biocompatibilità. Sviluppo di materiali polimerici contenenti porfirine, fullereni e ftalocianine funzionalizzati, per optoelettronica e sensoristica molecolare per specifiche applicazioni. Sviluppo di tecnologie chimiche innovative per lo studio di problematiche in campo biologico, medico e agro-alimentare. In particolare, si applicano le più recenti metodologie di proteomica per lo studio della sofisticazione alimentare e di sistemi biologici quali la lacrima umana e di glicomica per lo studio sia della lacrima umana, sia del siero di pazienti affetti da malattie della glicosilazione primaria o secondaria. Biosintesi e caratterizzazione di polioidrossialcanoati a lunghezza media di catena (mediumchain length polyhydroxyalkanoates, MCL-PHA) da acidi grassi e oli vegetali esausti

Stato dell'arte

La ricerca nel settore dell'imballaggio per l'agroalimentare si è fortemente indirizzata alla realizzazione di "materiali ingegnerizzati" in cui le proprietà possano essere modulate in base all'applicazione richiesta. Queste problematiche prevedono la messa a punto di sistemi polimerici multicomponente a base poliammidica, poliestere e policarbonato, allo scopo di ottenere materiali con specifiche proprietà, partendo da polimeri di massa già esistenti in commercio. La sintesi di nanomateriali ibridi organici/inorganici è un'interessante approccio per ottenere sensori altamente sensibili. Molecole quali porfirine e ftalocianine, capaci di interagire con numerose molecole modificando lo spettro di assorbimento, sono adatti allo scopo. La spettrometria di massa è attualmente la tecnica più importante per la determinazione della struttura di sistemi naturali quali polisaccaridi e proteine, requisito fondamentale per la comprensione delle relazioni proprietà/struttura. L'ICTP di Catania, leader a livello internazionale in questo settore, ha avviato alcuni progetti con numerose collaborazioni nazionali ed all'interno di un network europeo (finanziato dalla UE)

Azioni

Attività da svolgere

Sviluppo di materiali polimerici multicomponente a base di poliesteri, poliammidi e policarbonato mediante processi di miscelazione reattiva allo stato fuso, per l'utilizzo nei settori dell'imballaggio agroalimentare e il biomedicale. Studio Processi di biodegradazione e invecchiamento accelerato di polimeri. L'attività di ricerca prevede lo sviluppo di materiali nanostrutturati a base di porfirine, ftalocianine, fullereni ed ancoraggio, su quarzo, silicio, oro per lo sviluppo di sensori molecolari. Studio delle glicoproteine del siero di soggetti con malattie della glicosilazione. Studio del proteoma del fluido lacrimale. Lo studio di nuovi metodi di indagine mediante spettrometria di massa MALDI di lipooligosaccaridi. Biosintesi e caratterizzazione di



poliidrossialcanoati a lunghezza media di catena (mediumchain length polyhydroxyalkanoates, MCL-PHA) da acidi grassi e oli vegetali esausti.

Punti critici e azioni da svolgere

I punti critici per raggiungere gli obiettivi di ricerca non sono di natura scientifica in quanto questi sono problemi che siamo abituati ad affrontare e risolvere ma sono invece di natura organizzativo e strutturale, come di seguito elencato.- Mancanza di risorse economiche certe ed adeguate per poter effettuare una programmazione pluriennale di attività di ricerca.- Difficoltà a trattenere giovani ricercatori alla fine del loro processo di formazione - Personale strutturato a tempo indeterminato insufficiente al raggiungimento degli obiettivi -Assenza di adeguati locali per la realizzazione delle attività di ricerca

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze proprie dei ricercatori afferenti alla commessa possono essere così riassunti:- Sintesi, modifica chimica e funzionalizzazione di polimeri.-Funzionalizzazione e modifica chimica di ftalocianine, porfirine e fullereni.- Processi di miscelazione reattiva.- Materiali polimerici da sintesi microbiche.- Spettrometria di massa di polimeri sintetici e naturali - Spettrometria NMR di polimeri sintetici e naturali- Biodegradazione, degradazione termica, termo-ossidativa e foto-ossidativa di polimeri.Lo sviluppo delle attività previste nella commessa saranno supportate dall'utilizzo di tecniche di indagine chimica e chimico-fisiche (NMR, spettrometria di massa, GPC, TG, DSC, NMR, HPLC, spettroscopia FT-IR e UV-VIS)

Collaborazioni (partner e committenti)

Comitenti: - MIUR: bando MIUR 1105, dal titolo "Relazioni struttura - Proprietà di polimeri semicristallini" ("RESPO")- Regione Sicilia:, Progetto "Innovazione e Tecnologie per il miglioramento della sostenibilità agroindustriale, della sicurezza e della qualità alimentare". 2)Progetto "Tecnologie sensoristiche e sistemi automatici intelligenti per l'innalzamento competitivo delle attività produttive" - UE: Progetto "Euroglycanet" (Coordination action)- SIFI SPA: contratto per collaborazione ad attività di ricerca.Collaborazioni Uni Catania Dipartimento di Chimica, Uni Genova. ICPFCNR Sezione di Messina IMM,CNR- Catania; ISMAC,CNR, Sez. Genova; ICB, CNR Sez. Catania; Max Planck Institute, Germania ST Microelectronics; Pirelli Labs, Milano; Milena Pharmaceuticals, Agrigento; SIFI spa; Zappalà srl; Uni of Ireland; Uni College Dublin; Uni of Leuven; Uni Napoli Federico II Policlinico, Uni di Trieste, ISA Cnr Avellino Uni della Calabria; Uni di Messina Complex Carbohydrate Research Center, University of Georgia, Athens, USA.

Finalità

Obiettivi

Sviluppo di materiali polimerici nanostrutturati contenenti porfirine, ftalocianine,fullereni per lo sviluppo di sensori molecolari. Sviluppo di materiali polimerici multicomponente a base di poliesteri, poliammidi e policarbonato per l'utilizzo nei settori dell'imballaggio agroalimentare e il biomedicale. Studio Processi di biodegradazione e invecchiamento accelerato di polimeri. Studio del proteoma del fluido lacrimale. Studio delle glicoproteine del siero di soggetti con malattie della glicosilazione. Lo studio di nuovi metodi di indagine mediante spettrometria di massa MALDI di lipooligosaccaridi.Biosintesi e caratterizzazione di poliidrossialcanoati a lunghezza media di catena (mediumchain length polyhydroxyalkanoates, MCL-PHA) da acidi grassi e oli vegetali esausti.

Risultati attesi nell'anno

Materiali polimerici multicomponente a base di poliesteri, poliammidi e policarbonato con proprietà adatte per il settore dell'imballaggio e biomedicale. Studio dei processi di invecchiamento di termo e fotossidazione di polimeri e di biodegradazione. Materiali polimerici con proprietà elettro-ottiche e con proprietà sensoristiche contenenti porfirine, ftalocianine, fullereni. Superfici funzionalizzate per la realizzazione di sensori molecolari. Glicomica della Galattosemia. Nuovi metodi d'indagine MALDI/MS di lipopolisaccaridi. Poliidrossialcanoati a lunghezza media di catena (mediumchain length polyhydroxyalkanoates, MCL-PHA) da acidi grassi e oli vegetali esausti ottenuti mediante sintesi batteriche.Pubblicazioni, Brevetti, Nuovi materiali.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- Processi per la produzione di materiali multicomponenti con proprietà mirate a base di poliesteri,poliammidi, policarbonati.- Procedure per la preparazione di sistemi nanostrutturati organici/inorganici per l'utilizzo come sensori molecolari.- Materiali per la Stabilizzazione Polimeri all'invecchiamento ambientale.- Nuovi Farmaci

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Materiali polimerici biodegradabili e con proprietà mirate per una migliore qualità della vita. Sensori molecolari per la sicurezza in campo alimentare ed ambientale.Metodologie chimiche innovative per la



formulazione di diagnosi più precise e il monitoraggio di malattie rare mediante l'uso di biomarkers e tecniche avanzate di spettrometria di massa

Moduli

Modulo: Sviluppo e caratterizzazione di materiali polimerici biocompatibili e/o biodegradabili di origine sintetica e naturale
Istituto esecutore: Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Catania

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
971	146	1452	142	2711	40	1638	148	N.D.	2899

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo *</i>	
ricercatori	Totale
14	22

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	1	0	0	0	3	3	7

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	16	16	34

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche



Elettrocatalizzatori a base di metalli della prima serie di transizione, o a bassissimo contenuto di platino, per fuel cells alimentate ad idrogeno o ad alcool diretto

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica dei composti organo - metallici
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	FRANCESCO VIZZA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Apa Iolanda	VII	Dal Santo Vladimiro	III	Nigri Anna	VII
Barbaro Pierluigi	III	Damiani Stefania	VII	Oberhauser Werner	III
Barbieri Giuseppe	III	Donzellini Simonetta	IV	Peruzzini Maurizio	II
Bartoli Carlo	VI	Giambastiani Giuliano	III	Psaro Rinaldo	I
Biagiotti Francesco	VII	Ienco Andrea	III	Santarelli Massimo	VIII
Bianchi Annabella	II	Masi Dante	IV	Sordelli Laura	III
Bianchini Claudio	I	Mealli Carlo	I	Vizza Francesco	II
Bonaccini Marusca	IV	Meli Andrea	II		
Cecconi Franco	IV	Migliacci Fabio	IV		
		Moneti Simonetta	III		

Temi

Tematiche di ricerca

Progettazione e sviluppo di nuovi elettrocatalizzatori a base di metalli della prima serie di transizione o a bassissimo contenuto di platino, per fuel cells alimentate ad idrogeno o ad alcool diretto. Piano di lavoro: sintesi di leganti e polimeri templanti per la coordinazione di composti metallici; sintesi di monomeri da impiegarsi per la produzione di ionomeri; sintesi di nanoparticelle metalliche supportate su materiali porosi conduttivi, con dimensioni, distribuzione e morfologia controllate; sintesi di membrane polimeriche ed ibride a scambio cationico o anionico attraverso varie metodologie tra cui la funzionalizzazione di polimeri a base poliolenfinica anche fluorurata con radiazioni gamma, casting di copolimeri o omopolimeri lineari in presenza di ionomeri. Sintesi di membrane per la purificazione di idrogeno per PEMFC; valutazione dell'attività elettrochimica dei singoli elettrodi, delle MEA e delle celle monoplanari; sviluppo hardware di cella. Caratterizzazione dei materiali: microscopia elettronica, tecniche XPS, EXAFS, WAXS, SAXS, BET, SANS, AFM, XRPD, porosimetria, AA, UV-vis; analisi Rietveld; studi di assorbimento di gas (TPR, TPO, TP

Stato dell'arte

La crescente domanda di energia è alla base dell'interesse nelle celle a combustibile (FC). Per le FC a bassa temperatura il limite più importante è costituito dal fatto che il platino, elemento essenziale nei catalizzatori noti, è scarso in natura, e' troppo costoso ed è anche inefficace con alcoli, soprattutto con gli omologhi superiori del metanolo (es. etanolo, glicole etilenico). Solo elettrocatalizzatori più attivi e a base di metalli non nobili (es. Fe, Co, Ni) potrà permettere la diffusione delle FC. Ciò comporta la progettazione e sviluppo di catalizzatori senza metalli nobili e pertanto di membrane polimeriche a scambio anionico. Per quanto riguarda le PEMFC ad idrogeno, e' necessario sviluppare nuove membrane ad alta conducibilità e stabilità termica (130- 150 C).



Azioni

Attività da svolgere

1) Sviluppo e realizzazione di nuovi catalizzatori anodici a base di metalli della prima serie di transizione o contenenti una bassa percentuale di metallo nobile (es. platino) per elettrodi di FC ad idrogeno e a combustibile diretto, preferibilmente etanolo, glicol etilenico e carboidrati in soluzioni acquose; 2) catalizzatori catodici a base di metalli non-nobili ad alta attività e insensibili agli alcoli di cross-over; 3) membrane polimeriche ad alta conducibilità a scambio anionico stabili a temperature a 60 °C e a scambio protonico stabili fino a 130-150 °C, MEA e hardware di celle monoplanari; 4) sviluppo di membrane selettivamente permeabili; 5) Caratterizzazione chimico-fisica (TOSCA, NMR, HRTEM, SEM, XDX, XPS, EXAFS, ICPMS-laser) e valutazione completa dei materiali; 6) Sviluppo di ionomeri cationici ed anionici altamente conduttivi.

Punti critici e azioni da svolgere

Lentezza nel processo di caratterizzazione dei catalizzatori per la mancanza di un microscopio elettronico TEM in alta risoluzione a Firenze ed in Toscana. Devono essere migliorate le competenze in elettrochimica. Si ritiene necessario per un salto di qualità della commessa l'assunzione di almeno 2 giovani ricercatori di cui uno almeno a tempo indeterminato.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Competenze e tecnologie: sintesi organiche, inorganiche e metallorganiche; preparazione di catalizzatori nanostrutturati; preparazione di membrane polimeriche organiche, inorganiche ed ibride; preparazione di ossidi misti, materiali microporosi, nanoporosi e/o nanoparticellari; caratterizzazione di catalizzatori solidi e di superfici; caratterizzazione di materiali di supporto e di membrane; modellizzazione teorica di superfici, di nanoparticelle, di supporti porosi, di materiali conduttivi e di membrane; studi elettrochimici (voltammetria ciclica, curve di potenza e di polarizzazione, spettroscopia di impedenza); sviluppo di componentistica e di hardware di cella. Tecniche di indagine: microscopia elettronica (TEM, SEM, ESEM); caratterizzazione spettroscopica e strutturale di solidi e superfici (XPS, EXAFS, WAXS, SAXS, BET); caratterizzazione chimico-strutturale dei materiali catalitici con tecniche SANS, AFM, XRPD, porosimetria, AA, UV- vis; analisi Rietveld; studi di assorbimento di gas a temperatura programmata (TPR, TPO, TPD); NMR; IR; banchi per la valutazione delle performance di cella; potenziostati-galvanostati; officina meccanica

Collaborazioni (partner e committenti)

Piccola Media Impresa: ARGUS CHEMICAL (Italia), Acta spa (Italia). Organizzazione Internazionale: Unione Europea, Network of Excellence "IDECAT" Ministero: MIUR FISR. Università: University of Edinburgh (UK), Università di Roma la Sapienza, Università di Pisa, Università di Pavia. Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT) (Daejeon, SOUTH KOREA), Dipartimento di Ingegneria Chimica e dei Materiali, Università della Calabria, Rende CS CEMIF.CAL.

Finalità

Obiettivi

Elettrocatalizzatori anodici e catodici privi di platino o a bassissimo contenuto di platino per elettrodi di FC ad idrogeno e a combustibile diretto, preferibilmente etanolo e carboidrati in soluzioni acquose; Monomeri e membrane ad alta conducibilità a scambio anionico stabili a temperature a 60 °C e a scambio protonico stabili fino a 130-150 °C (almeno 3 prodotti) – MEA e hardware di cella monoplanari. Caratterizzazione e valutazione completa dei materiali. L'obiettivo finale è quello di ottenere densità di potenza non inferiori a 50 mW/cm² con celle ad alcol diretto. Pubblicazioni scientifiche, brevetti di invenzione, trasferimento tecnologico.

Risultati attesi nell'anno

Almeno 4 nuove formulazioni di catalizzatori anodici e catodici senza platino e 2 formulazioni di catalizzatori anodici contenenti leghe in cui il contenuto di metallo nobile sia largamente minoritario rispetto ai metalli non-nobili. Completa caratterizzazione degli elettrocatalizzatori anodici e catodici, membrane e ionomeri. L'obiettivo finale sarà quello di ottenere densità di potenza superiori a 50 mW/cm² con FC ad etanolo (temperatura e pressione ambiente) e 150 mW/cm² con FC ad idrogeno. Pubblicazioni scientifiche e brevetti di invenzione.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Microgenerazione di energia (10-100 W) attraverso la costruzione di generatori portatili costituiti da stack di celle alimentate con soluzioni acquose di alcoli e da aria. Sviluppo di dispositivi per alimentare strumenti di elettronica portatile (telefoni cellulari, computers portatili, lampade di emergenza). Entrambi i settori hanno una rilevanza industriale ed economica di primo piano (centinaia di milioni di pezzi). Obiettivo futuro: dispositivi APU per automotive.



- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Distribuzione di piccole potenze per elettronica e sistemi ausiliari in località remote dove l'energia distribuita non arriva. Uso di combustibile rinnovabili, a basso o nullo effetto serra, come l'etanolo per la produzione di energia. Nuovi posti lavoro. Solo presso ACTA SpA, in collaborazione con ICCOM e ISTM, sono stati creati nel 2005 20 nuovi posti di lavoro tra cui 10 chimici, molti dei quali formati presso istituti CNR.

Moduli

Modulo: Elettrocatalizzatori a base di metalli della prima serie di transizione, o a bassissimo contenuto di platino, per fuel cells alimentate ad idrogeno o ad alcool diretto

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Elettrocatalizzatori a base di metalli della prima serie di transizione, o a bassissimo contenuto di platino, per fuel cells alimentate ad idrogeno o ad alcool diretto

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Elettrocatalizzatori a base di metalli della prima serie di transizione, o a bassissimo contenuto di platino, per fuel cells alimentate ad idrogeno o ad alcool diretto

Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
347	115	192	0	654	229	536	90	N.D.	973

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
5	7

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
1	2	0	3	0	0	0	0	4	10

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	3	4	7

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Catalizzatori per la produzione chemo-, regio- e stereoselettiva di fine chemicals

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica dei composti organo - metallici
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIOVANNI VITULLI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Apa Iolanda	VII	Donzellini Simonetta	IV	Migliacci Fabio	IV
Barbaro Pierluigi	III	Ferraccioli Raffaella	III	Nigri Anna	VII
Bartoli Carlo	VI	Giambastiani Giuliano	III	Oberhauser Werner	III
Biagiotti Francesco	VII	Giorno Lidietta	III	Penso Michele	III
Bianchi Annabella	II	Gonsalvi Luca	III	Pertici Paolo	II
Bianchini Claudio	I	Maia Angelamaria	II	Peruzzini Maurizio	II
Bonaccini Marusca	IV	Masi Dante	IV	Rizzo Simona	III
Cecconi Franco	IV	Mealli Carlo	I	Santarelli Massimo	VIII
Damiani Stefania	VII	Meli Andrea	II	Settambolo Roberta	III
Donato Laura	III	Midollini Stefano	II	Vitulli Giovanni	I

Temi

Tematiche di ricerca

L'attività di ricerca prevede la progettazione, sintesi ed applicazioni catalitiche di catalizzatori ad elevata attività e selettività per la produzione sostenibile di prodotti di interesse della chimica fine, farmaceutica ed agroalimentare. In particolare di catalizzatori nanostrutturati a dispersione e morfologia controllati, di catalizzatori colloidali, di catalizzatori solidi acidi, di catalizzatori bifunzionali, di catalizzatori molecolari eterogeneizzati di origine biologica e/o biomimetici su membrane polimeriche, di fotocatalizzatori. Principali processi: idrogenazioni, ossidazioni e carbonilazione chemo-, regio- ed enantioselettive di substrati di interesse industriale; risoluzione di miscele racemiche; attivazione del legame C-H e la conversione selettiva di idrocarburi in composti di interesse in chimica fine.

Stato dell'arte

La catalisi chemo-, regio- ed enantioselettiva promossa da catalizzatori a base di metalli di transizione riveste una notevole importanza economica oltre che scientifica. Grande interesse è concentrato sullo sviluppo di catalizzatori metallici nanostrutturati e su catalizzatori enantioselettivi supportati su materiali che ne permettano il recupero ed il riciclo. L'attività catalitica di particelle metalliche è legata a molti fattori fra cui dimensione, dispersione e morfologia che vanno opportunamente modulate per conseguire la desiderata selettività ed attività. Per quanto riguarda i catalizzatori enantioselettivi il loro sviluppo implica una profonda conoscenza della chimica molecolare (sintesi e modifica di leganti chirali) e dei metodi di eterogeneizzazione, come pure quella dei materiali di supporto.

Azioni

Attività da svolgere

La commessa ha maturato una notevole esperienza nella preparazione di sistemi catalitici contenenti particelle metalliche nanostrutturate utilizzando vapori di metalli come reagenti, secondo una tecnica nota come 'Metal Vapour Synthesis'. Verranno valutati i fattori che regolano il processo di aggregazione delle particelle metalliche e verranno approfonditi gli studi sulla relazione fra struttura del catalizzatore ed attività catalitica. Verranno esplorate tecniche diverse per la eterogeneizzazione di macromolecole ad attività biologica e biomimetica su membrane e supporti non-woven. Verranno sviluppate tecniche innovative di eterogeneizzazione di catalizzatori molecolari stereo e regioselettivi, finalizzate al recupero e riciclo del catalizzatore.

Punti critici e azioni da svolgere

Il programma richiede una valutazione della concentrazione del metallo nei solvatati, attraverso analizzatori ad assorbimento atomico non disponibili in sede. E' inoltre indispensabile migliorare le prestazioni del reattore con un più efficace sistema di pompaggio ed una migliore coibentazione della camera di reazione. Il punto critico nell'utilizzo di membrane enantioselettive per la risoluzione di miscele racemiche è la bassa



selettività allo stato stazionario. Fra le azioni da svolgere va evidenziata la funzionalizzazione omogenea ed uniforme di matrici polimeriche altrimenti impermeabili. Un punto critico è l'ottenimento di catalizzatori stereoselettivi riutilizzabili che mostrino efficienze paragonabili ai catalizzatori omogenei senza perdita di attività di metallo pesante.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi organometallica. Sintesi organica. Vaporizzazione di metalli. Catalisi omogenea. Catalisi eterogenea. Catalisi asimmetrica. Sistemichirali a membrana. Foto(elettro)catalisi. Tecniche analitiche spettroscopiche. Tecniche analitiche cromatografiche. Tecniche di ancoraggio di catalizzatori. Microscopia elettronica. Utilizzo di banche dati Modellistica chimica

Collaborazioni (partner e committenti)

Università: Torino, Milano, Pavia, Lecce, Palermo, La Sapienza, Venezia, Insubria, Bari, Pisa e Firenze. CNR: IRMERC, ISMN, ICIS, ISM, ISMAC, ISTM. Industrie: AKZO Nobel, Italcementi, Ceramiche Gambarelli. Ministeri: MIUR (FIRB). Dept. of Inorganic Chemistry, State Pedagogical University, S. Petersburg, Russia; State Chemical Technological University, Dnepropetrovsk, Ucraina; CTG Bergamo; Oxford University, Regno Unito; Rutgers, The State University of New Jersey, USA; Dipartimento di Chimica Imperial College of Science, Technology and Medicine (London, UK) Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT) (Daejeon, SOUTH KOREA); ETHZ, Zurigo, Svizzera.

Finalità

Obiettivi

Preparazione di prodotti di rilevanza della chimica fine, farmaceutica ed agroalimentare mediante reazioni quali l'idrogenazione catalitica selettiva di substrati organici polifunzionali, l'idroformilazione e sililformilazione di substrati olefinici ed acetilenici, la conversione di idrocarburi in prodotti ad alto valore aggiunto. La produzione di isomeri otticamente attivi mediante sistemi chinali a membrana. Sviluppo di tecniche per l'eterogeneizzazione ed il riutilizzo di catalizzatori molecolari stereo e regio selettivi.

Risultati attesi nell'anno

Individuazione dei fattori che regolano le aggregazioni di atomi metallici (fase vapore) nei solvatati metallo-legante organico (fase liquida) e nella disposizione su supporti (fase solida). Successiva preparazione mirata di catalizzatori a più alta attività e selettività. Identificazione dei parametri metrici da adoperare per lo studio sperimentale e teorico dei sistemi biocatalitici eterogeneizzati a membrana. Membrane funzionalizzate anche mediante tecniche di molecular imprinting e determinazione della selettività stazionaria. Sviluppo di catalizzatori misti eterogenei con alta selettività e capacità di riciclo nella idrogenazione regioselettiva di areni.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Chimica fine; Industria farmaceutica; Industria agroalimentare

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Sviluppo sostenibile, potenziamento dell'industria nazionale.

Moduli

Modulo: Catalizzatori per la produzione chemo-, regio- e stereoselettiva di fine chemicals

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Catalizzatori per la produzione chemo-, regio- e stereoselettiva di fine chemicals

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Catalizzatori per la produzione chemo-, regio- e stereoselettiva di fine chemicals

Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto



Modulo: Catalizzatori per la produzione chemo-, regio- e stereoselettiva di fine chemicals
Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
570	112	18	0	700	70	200	121	N.D.	891

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
9	10

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
5	0	2	0	0	0	0	0	1	8

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	2	0	2

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Catalizzatori per l'abbattimento di inquinanti atmosferici

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Sede principale svolgimento:	Palermo
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ANNA MARIA VENEZIA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Agostini Enrico	VIII	Granatiero Carolina	VIII	Raponi Giampaolo	VII
Baldana Franca	VII	Irrera Gaetano	VIII	Scalici Rosalia	VII
Bellanti Fiorenzo	IV	Liotta Leonarda Francesca	III	Semprini Elvio	II
Bellanti Giovanna	VII	Longo Alessandro	III	Stefani Ferdinanda	II
Cafarelli Patrizia	V	Lora Mauro	V	Testa Maria Luisa	III
Cecchetti Antonella	VI	Mannocchi Antonio	V	Tomlinson Anthony Arthur	II
De Stefanis Adriana	III	Mannocchi Rita	VII	Venezia Anna Maria	I
Deganello Francesca	III	Mattei Daniele	VII		
Giordano Francesco Maria	VI	Mingoia Francesco Michele	III		
		Plutino Maria Rosaria	III		

Temi

Tematiche di ricerca

1. Sviluppo di catalizzatori per abbattimento NO_x, CO e CH_x: sistemi a "3-vie" Pt/Pd/CeO₂-ZrO₂ per l'abbattimento contemporaneo dei tre inquinanti. Aumento della stabilità termica dei supporti ed estensione della finestra del rapporto aria /combustibile (A/F > 14.7) alle condizioni di alimentazione magra. Sviluppo della catalisi dell'oro per processi a bassa temperatura che riguardano l'abbattimento del monossido di carbonio in presenza di idrogeno (PROX). 2. Sviluppo di catalizzatori per il miglioramento dei combustibili fossili al fine di ottemperare alle nuove norme sul contenimento dell'inquinamento dovuto alla SO₂ e aromatici che vengono emessi durante la combustione. 3. Sviluppo di nuovi sistemi catalitici per la combustione totale del metano al fine di utilizzare tale risorsa come combustibile alternativo al diesel e benzina e inoltre per ridurre l'inquinamento che deriva dalla parziale ossidazione a CO e dal metano incombusto considerato un gas a forte effetto serra. 4. Nuovi materiali ad alta conducibilità protonica e conduzione di ossigeno come elettrocatalizzatori in FC. 5. Sintesi di nuovi leganti chirali per catalisi asimmetrica

Stato dell'arte

Il mercato dei catalizzatori in Europa si aggira sui 5 miliardi di €/anno. Tuttavia la leadership europea in questo campo diminuisce per una diminuzione di investimenti in RD e per il trasferimento dei processi produttivi di base in paesi a basso costo. Occorre quindi aumentare la competitività aumentando gli investimenti per lo sviluppo di catalizzatori ad alto contenuto tecnologico. La catalisi è attualmente coinvolta in problematiche di salvaguardia dell'ambiente mondiale come le piogge acide, lo smog chimico, le emissioni di gas ad effetto serra e la distruzione dello strato di ozono. Inoltre è correlata con aspetti che riguardano la salute degli esseri viventi, la produzione sostenibile di energia (idrogeno, fotovoltaico, conversione della biomassa e combustibili più puliti) e un uso più efficiente delle risorse naturali. Lo stato dell'arte della catalisi ambientale consiste nella miniaturizzazione dei processi catalitici. A tale scopo la catalisi si rivolge all'utilizzo delle nanotecnologie per l'ottenimento di nuovi catalizzatori che tendano a ridurre la complessità dei rischi e della produzione di scorie.

Azioni

Attività da svolgere

Sviluppo di a) catalizzatori per la riduzione di NO_x con CO e con idrocarburi; b) catalizzatori per la idrogenazione degli aromatici e desolfurazione; c) catalizzatori per la ossidazione totale del metano; d) catalizzatori per la ossidazione selettiva del CO in presenza di idrogeno; e) elettrocatalizzatori per FC; f) sistemi porfirinici nella catalisi asimmetrica e ambientale; g) catalizzatori per sintesi chemo regio e stereoselettiva; h) sistemi policiclici di interesse biologico.



Punti critici e azioni da svolgere

La catalisi eterogenea si può considerare una tecnica empirica e pertanto soffre del problema di scarsa riproducibilità del comportamento catalitico di determinati sistemi. Per ovviare a questo occorre quindi intensificare l'approccio teorico-modellistico che permetterebbe il controllo e la conoscenza delle variabili che influenzano tale comportamento. Sul fronte della adeguatezza dei mesi/uomo dedicati occorrono alcune unità di personale: a) 2 ricercatori e 1 tecnologo previsti nei concorsi riservati al Mezzogiorno. Per la strumentazione esiste a) la necessità di una apparecchiatura NMR; c) necessità di attrezzare un laboratorio apposito dotato di misure di sicurezza particolari in cui sia possibile effettuare test catalitici con gas tossici a pressioni elevate.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Per la realizzazione degli obiettivi della ricerca verranno utilizzate competenze nell'ambito della sintesi e della caratterizzazione delle proprietà di superficie e strutturali. Sono richieste competenze di spettroscopia fotoelettronica e di diffrazione a raggi x. Inoltre è necessario l'utilizzo di tecniche sofisticate come EXAFS, XANES che richiedono tempo macchina nei centri di luce di sincrotrone. L'acquisto di una apparecchiatura NMR per stato solido è fortemente auspicata per la determinazione strutturale a livello molecolare. Una parte importante della commessa verte sulla comprensione dei meccanismi di reazione e quindi sullo sviluppo di modelli cinetici che riproducano i risultati sperimentali derivanti dai test catalitici.

Collaborazioni (partner e committenti)

La commessa coinvolge rapporti di collaborazione con numerosi Istituti di ricerca Italiani e stranieri e mondo industriale quali: Dipt. di Chimica and Dipt. di Ingegneria dei Materiali-Palermo; Dipt di Chimica- Messina; Dipt. di Chimica-Triste; Istituto CNR -ITAE- Me; IENI-Pd; ISMN-Bo; ICCOM-Fi; ISTM-Mi; Dipt. Chimica-Valencia Spagna; Hungarian Academy of Science - BUDAPEST; Bulgarian Academy of Science-SOFIA; Indian Institute of Petroleum- Dehradun India; RCAST (Research Center for Advanced Science and Technology) dell'Università di Tokyo, ENI Tecnologie- San Donato; Centro Ricerche FIAT.

Finalità

Obiettivi

a) Sintesi di catalizzatori a base di metalli supportati su ossidi, attivi e selettivi e con elevata stabilità. E' importante che riducano gli NOx in condizioni di eccesso di aria nella miscela combustibile. b) Preparazione via sol-gel di ossidi ad alta area e resistenti alla sinterizzazione per ossidazione del metano. c) Supportazione di oro metallico su ossidi redox per la ossidazione selettiva del CO in presenza di idrogeno. d) Nuovi materiali ad alta conducibilità protonica e conduzione di ossigeno come elettrocatalizzatori nelle celle a combustibile (FC). e) Sintesi di nuovi leganti chirali per catalisi asimmetrica

Risultati attesi nell'anno

1) Ottimizzazione dei sistemi Co/CeO₂ per combustione totale del metano 2) Aumento della selettività (>80%) di un catalizzatore a base di oro per la ossidazione di CO alle temperature operative delle celle a combustibile. 3) Nuovi materiali ad alta conducibilità protonica e conduzione di ossigeno come elettrocatalizzatori in FC 4) Sviluppo di reazioni multistep sequenziali mediate da catalisi di Au (III) e da Fe(0) AcOH. 5) Sintesi di nuovi leganti chirali per catalisi asimmetrica

Potenziale impiego

- per processi produttivi

I risultati della commessa, relativamente allo sviluppo dei catalizzatori per l'abbattimento degli NOx, CO e CHx possono aver una applicazione tecnologica nello sviluppo delle marmitte catalitiche e quindi nel settore autotrasporti. Similmente, lo sviluppo di catalizzatori per la combustione totale del metano è al vaglio dell'interesse applicativo da parte della FIAT. In collaborazione con il centro ricerche FIAT vengono provati nelle condizioni di utilizzo reali i sistemi sviluppati dalla commessa.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Catalizzatori per l'abbattimento di inquinanti trovano possibile impiego sia nel settore dei veicoli da trasporto, che nei sistemi stazionari di produzione di energia. Possibile applicazione anche in filtri per la purificazione dell'aria sia in zone di uso domestico che collettivo.

Moduli

Modulo:	Catalizzatori per l'abbattimento di inquinanti atmosferici
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Luogo di svolgimento attività:	Palermo



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
1101	170	6	181	1458	62	238	114	N.D.	1634

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
11	26

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
1	1	0	2	0	0	0	0	1	5

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	3	0	3

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Nuovi catalizzatori per 'commodities'

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIANLUCA POZZI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Bartoli Carlo	VI	Gonsalvi Luca	III	Pozzi Gianluca	III
Biagiotti Francesco	VII	Guidotti Matteo	III	Ravasio Maria Nicoletta	II
Bianchini Claudio	I	Masi Dante	IV	Saielli Giacomo	III
Bonaccini Marusca	IV	Migliacci Fabio	IV	Santarelli Massimo	VIII
Bonchio Marcella	III	Moneti Simonetta	III	Settambolo Roberta	III
Cecconi Franco	IV	Oberhauser Werner	III	Vitulli Giovanni	I
Damiani Stefania	VII	Pertici Paolo	II	Vizza Francesco	II
Donzellini Simonetta	IV				

Tem

Tematiche di ricerca

Catalizzatori e processi catalitici innovativi per la trasformazione di materie prime rinnovabili in prodotti di interesse industriale (lubrificanti, tensioattivi, solventi, combustibili...). Sviluppo di catalizzatori eterogenei ed omogenei riciclabili per l'ossidazione di composti organici mediante ossigeno o H₂O₂, possibilmente utilizzabili in mezzi di reazione non convenzionali (H₂O, fluorous phase, liquidi ionici...) e/o supportabili su membrane polimeriche, in grado di utilizzare tecniche di attivazione alternative quali irradiazione con microonde e fotochimica.

Stato dell'arte

La crescente richiesta di sistemi catalitici efficienti ed eco-compatibili per la produzione di commodities determina la tendenza ad eliminare l'uso di metalli pesanti tossici o costosi, a semplificare le procedure di preparazione del catalizzatore ed a ricercare condizioni di impiego che ne consentano il facile recupero e riciclo. Ciò è attivamente perseguito sia nel campo della trasformazione di oli vegetali in prodotti industriali di alta qualità e a basso impatto ambientale che nei processi di funzionalizzazione ossidativa di molecole organiche, per i quali è di massima importanza la possibilità di usare ossidanti puliti e convenienti come H₂O₂ e O₂.

Azioni

Attività da svolgere

Verranno studiati a) catalizzatori e processi catalitici innovativi per la trasformazione di materie prime rinnovabili in prodotti di interesse industriale; b) attivazione, mediate catalizzatori e/o metodi fisici di varia natura, di ossigeno molecolare e H₂O₂ al fine di ossidare selettivamente composti organici; c) catalizzatori per carbonilazione di olefine e copolimerizzazione di tipo non alternante di CO/olefine. Queste attività sono illustrate in maggiore dettaglio nelle schede dei singoli moduli.

Punti critici e azioni da svolgere

Un punto critico rilevato da tutti i ricercatori coinvolti nella commessa riguarda la necessità di acquisire competenze specifiche in campo analitico, in particolare per la risoluzione di problemi legati alla natura eterogenea di alcuni catalizzatori. Problematiche più specifiche sono illustrate nelle schede dei singoli moduli.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze dei ricercatori impegnati nella commessa sono così riassumibili: a) sintesi organica, inorganica e metallorganica; b) preparazione di catalizzatori nanostrutturati; c) preparazione di catalizzatori "fluorous"; d) preparazione di ossidi misti, materiali microporosi, mesoporosi, nanoporosi e/o nanoparticellari; e) caratterizzazione di catalizzatori solidi e di superfici; caratterizzazione di catalizzatori organici e organometallici; f) preparazione di catalizzatori a sito singolo redox-attivo; g) preparazione di



catalizzatori eterogenei acidi o basici) conduzione di test catalitici (es. idrogenazione selettiva di metilesteri e trigliceridi, epossidazione selettiva di metilesteri, ossidazione di alcoli in sistemi bifasici liquido-liquido)

Collaborazioni (partner e committenti)

International University of Bremen (Prof. Ulrich Kortz); Université Claude Bernard- Lione (Prof. Denis Sinou); Jo ef Stefan Institute-Ljubljana (Dr. Jernej Iskra); Università di Roma Tor Vergata (Prof. Valeria Conte); Università della Calabria (Prof. Olga Bortolini); Stazione Sperimentale Oli e Grassi; Centro di Eccellenza CIMAINA (Università di Milano); Collaborazioni con varie industrie del settore oleochimico

Finalità

Obiettivi

a) Sviluppo di nuovi catalizzatori per oleochimica e di processi innovativi di idrogenazione selettiva e di epossidazione in fase eterogenea di oli vegetali. b) Sviluppo di catalizzatori e processi per la produzione di biodiesel a partire da materie prime alternative non appartenente alla filiera alimentare c) Sviluppo di nuovi catalizzatori per ossidazioni chemo- e stereoselettive per applicazioni in diversi sistemi di fase d) Sviluppo di nuovi catalizzatori per ossidazioni aerobiche.

Risultati attesi nell'anno

Valorizzazione di una domanda di Brevetto recentemente depositata riguardante un metodo per la produzione di biodiesel. Messa a punto ed ottimizzazione di metodi catalitici innovativi nel campo degli 'oleochemicals'. Realizzazione di catalizzatori eterogenei strutturalmente definiti per l' attivazione dell'ossigeno molecolare e di H₂O₂. Sviluppo di fotocatalizzatori, in particolare fluorous sensitizers porfirinici e fotocatalizzatori ibridi a base di complessi poliossometallati, in grado di attivare l'ossigeno molecolare tripletto. Aumento della produttività di sistemi catalitici a base di Pd impiegati nella produzione di polichetoni non alternanti daolefine e CO.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Produzione di biodiesel, epossidi, lubrificanti, oleochemicals vari e processi selettivi di ossidazione catalitica.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

L' utilizzo razionale di materie prime rinnovabili e la messa a punto di processi chimici eco-compatibili sono essenziali per lo sviluppo sostenibile auspicato da settori sempre più ampi della nostra società.

Moduli

Modulo: Nuovi catalizzatori per 'commodities'
Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Padova

Modulo: Nuovi catalizzatori per 'commodities'
Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Padova

Modulo: Nuovi catalizzatori per 'commodities'
Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Padova

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
438	168	105	0	711	143	416	166	N.D.	1020

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
8	9

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	1	3	0	0	0	0	2	6

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	1	1	3

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Nuovi materiali per produzione, purificazione e 'storage' di idrogeno

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	RINALDO PSARO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Apa Iolanda	VII	Damiani Stefania	VII	Pertici Paolo	II
Barbaro Pierluigi	III	Donzellini Simonetta	IV	Peruzzini Maurizio	II
Bartoli Carlo	VI	Gonsalvi Luca	III	Psaro Rinaldo	I
Biagiotti Francesco	VII	Ienco Andrea	III	Santarelli Massimo	VIII
Bianchi Annabella	II	Masi Dante	IV	Sordelli Laura	III
Bianchini Claudio	I	Mealli Carlo	I	Tasselli Franco	III
Bonaccini Marusca	IV	Midollini Stefano	II	Vitulli Giovanni	I
Cecconi Franco	IV	Migliacci Fabio	IV		
Dal Santo Vladimiro	III	Nigri Anna	VII		
		Oberhauser Werner	III		

Temi

Tematiche di ricerca

Preparazione, caratterizzazione e screening di catalizzatori rodio-supportati per l'ossidazione parziale di metano. Preparazione e caratterizzazione di catalizzatori metallici nanostrutturati, non contenenti metalli nobili, per steam e autothermal reforming di etanolo. Preparazione di membrane asimmetriche e composite polimeriche di vari tipi di materiali; caratterizzazioni della morfologia mediante SEM e delle loro proprietà di trasporto mediante misure di permeabilità a singoli gas. Preparazione di prototipi di un modulo da impiegare su un impianto dilaboratorio per la reale rimozione di idrogeno da una miscela di reazione. Ottenimento di Idruri metallici, materiali porosi e misti (MOF, metal-organic frameworks) per H-storage. Sintesi, caratterizzazione e reattività di complessi metallici capaci di attivare idrogeno.

Stato dell'arte

Attualmente, l'idrogeno viene principalmente prodotto su larga scala per "steam reforming" di metano, questa tecnologia non sembra tuttavia sufficiente a soddisfare la crescente domanda di H₂: Un'altra tecnologia di processo emergente è l'ossidazione parziale catalitica di metano. Del resto, dati i problemi di distribuzione e pericolosità dell'idrogeno, l'utilizzo di alcoli, gas naturale o idrocarburi più complessi, con una loro successiva trasformazione in H₂ rappresenta una soluzione tecnologicamente attraente al fine di poter utilizzare l'idrogeno per impieghi di piccola-media scala. Maggior parte delle membrane polimeriche attualmente utilizzate per separazioni di gas non sono particolarmente selettive nella separazione di idrogeno (in caso di gomme) oppure, quando sono sufficientemente selettive (in caso di polimeri vetrosi) soffrono di facile plasticizzazione in presenza di vapori o di gas condensabili, perdendo così le loro selettività o la resistenza meccanica e termica. Le attuali soluzioni di stoccaggio dell'idrogeno non sono tuttavia soddisfacenti in termini di densità energetica che rimane inferiore a quella di un carburante convenzionale.

Azioni

Attività da svolgere

Caratterizzazione spettroscopica e termoanalitica dei catalizzatori nanostrutturati supportati applicati nell'ossidazione parziale di metano e nello steam reforming di etanolo. Sviluppo del prototipo per la preparazione di catalizzatori via CVD a letto pseudo-fluidizzato. Sviluppo di catalizzatori di rame supportato per la deidrogenazione di alcoli e separazione dell'idrogeno prodotto, che prevede l'applicazione della tecnologia a membrana. Ottimizzazione delle membrane con più elevata superficie attiva, più alta porosità del supporto e più basso spessore dello strato attivo, ottenendo flussi più elevati, mantenendo un alto grado di permselectività. Studio approfondito di morfologia, proprietà meccaniche e proprietà di trasporto delle membrane e dei loro supporti porosi. Sintesi organica (nuovi leganti; funzionalizzazione idrosolubile). Sintesi inorganica/organometallica (sintesi di catalizzatori eterogenei per reforming; sintesi di idruri e MOF).



Studi di reattività degli idruri, studi di uptake e desorbimento di H₂. Modellizzazione teorica di meccanismi di reazione e uptake/release di H₂. Spettroscopia neutronica su campioni selezionati.

Punti critici e azioni da svolgere

A livello generale la carenza di personale è l'aspetto più critico, per le specifiche richieste si rimanda a quanto riportato nella previsione dei moduli di questa commessa. Per il modulo PM.P03.005.002 la mancanza di un microscopio elettronico TEM in alta risoluzione causa un tempo di attesa troppo elevato per la caratterizzazione dei catalizzatori nanostrutturati supportati. Trasferimento dei risultati della tecnologia da un modulo per le misure di permeabilità con singoli gas ad un prototipo di un modulo da utilizzare in un reattore per la reale rimozione di idrogeno durante una reazione di deidrogenazione e, eventualmente, per il recupero dell'idrogeno prodotto. Azioni: Sviluppo, anche ingegneristico, di un reale impianto, dopo l'iniziale 'prova di principio'.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze sono così riassumibili: a) sintesi di catalizzatori metallici nanostrutturati supportati; b) sintesi di ossidi misti, materiali microporosi, mesoporosi e nanoporosi; c) caratterizzazione avanzata di catalizzatori solidi e di materiali di supporto; d) conduzione di test catalitici; e) filatura di membrane a fibra cava, con morfologia asimmetrica e 'skin' denso; f) preparazione di membrane composite con lo strato selettivo denso depositato sul supporto poroso mediante tecniche di 'dip-coating'; g) sintesi e caratterizzazione di idruri metallici. Le tecniche di indagine sono tutte adeguate per gli obiettivi prefissati. Più nel dettaglio la caratterizzazione di materiali catalitici viene effettuata mediante tecniche termoanalitiche (TPR, TPO, TPD, chemisorbimento), spettroscopiche in situ operando (DRIFT-MS, EXAFS). Caratterizzazione in termini di permeabilità e selettività mediante misure di permeazione con singoli gas e con vapori. Studio della struttura e proprietà del legame M-H attraverso tecniche sperimentali e calcolo teorico, tecniche diffrattometriche di stato solido, metodi spettroscopici e di diagnostica neutronica.

Collaborazioni (partner e committenti)

Politecnico di Milano (Prof. A. Beretta, ossidazione parziale catalitica di metano) Università di Trieste (Dr. P. Fornasiero, steam reforming di etanolo) Network FIRENZE HYDROLAB (produzione H₂, spettro Raman) - Uni York, UK (Prof. PERUTZ, Fotochimica) - Uni Barcelona, E (Prof. LLEDOS, modellizzazione teorica) - INEOS RAS, Mosca, RUS (Prof. SHUBINA, H-bonding) - Uni Milano (Prof. ALBINATI, diffrazione X-ray; Prof. CARLUCCI, materiali ad alta porosità) - ISC CNR, Firenze (Dr. ZOPPI, tecniche neutroniche, accesso ad ISIS) - UNI Almeria, E (Prof. Romerosa, idruri idrosolubili) - ISTM CNR, Milano. EC network HYDROCHEM (contratto HPRN-CT-2002-00176). EC network AQUACHEM (contratto MRTN-CT-2003-503864).

Finalità

Obiettivi

a) Individuazione di catalizzatori di rodio supportati economicamente più vantaggiosi di quelli attualmente utilizzati nella produzione di idrogeno mediante l'ossidazione parziale di metano; b) Produzione efficiente ed economicamente competitiva di idrogeno ad elevata purezza mediante steam reforming di etanolo con catalizzatori a base di metalli non nobili; c) Sviluppo di nuove membrane polimeriche in grado di separare l'idrogeno da miscele di reazione con solventi organici; d) Ottenimento di idruri metallici, materiali porosi e misti (MOF, metal-organic frameworks) per H-storage; e) Sintesi, caratterizzazione e reattività di complessi metallici capaci di attivare idrogeno.

Risultati attesi nell'anno

Prototipo per CVD letto pseudo-fluidizzato per la preparazione di catalizzatori nanostrutturati. Sviluppo di catalizzatori eterogenei per reforming di idrocarburi contenenti metalli non nobili o bassa concentrazione di metalli nobili. Per la deidrogenazione individuazione del supporto ideale per catalizzatori a basso carico di rame e della famiglia di alcoli più idonei. Una serie di membrane con più elevata permeabilità (più alta porosità del supporto, più sottile strato composito) e superficie attiva. Completa caratterizzazione delle proprietà di trasporto e membrane sviluppate e applicazione per la rimozione dell'idrogeno da una miscela di deidrogenazione di alcoli. Realizzazione dei primi materiali MOF basati su frameworks di boro, carbonio e metalli dei gruppi principali e di transizione. Sintesi di uno o più leganti idrosolubili e dei relativi idruri complessi. Valutazione della loro efficienza in sistemi catalitici. Sintesi e caratterizzazione strutturale di nuovi idruri metallici, classici e non classici. Modellizzazione teorica dell'attivazione di H₂. Workshop sponsorizzato da Firenze Hydrolab sulla economia dell'idrogeno.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

L'attività che si propone riguarda aspetti strategici della ricerca relativa all'idrogeno come vettore energetico riconducibili ai seguenti settori: Produzione di idrogeno, da gas di sintesi (CO e H₂), con due processi produttivi: l'ossidazione parziale di metano e lo steam reforming di etanolo. Ogni processo che necessita la



separazione di idrogeno da altri gas e/o vapori. La flessibilità dei processi a membrana permette, l'applicazione su ogni scala, da laboratorio a scala pilota e scala industriale. Membrane sviluppate nel presente modulo sono utilizzabili in processi dove sono presenti vapori di solventi organici, dannosi per membrane comunemente utilizzate per separazioni di gas. L'immagazzinamento dell'idrogeno in materiali nanostrutturati ed in idruri metallici che agiscono da 'contenitori microscopici' efficienti e facilmente trasportabili.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

L'ipotesi di contribuire alla soluzione dei problemi energetici futuri mediante l'attuazione di un'economia ad idrogeno non può prescindere dall'acquisizione di ulteriori cognizioni sulla sua produzione, purificazione e immagazzinamento. Numerosi laboratori e centri di eccellenza, accademici e privati, in tutti i paesi più industrializzati affrontano queste tematiche di ricerca. L'immagazzinamento efficiente di idrogeno è ancora un collo di bottiglia verso lo sviluppo di un'economia basata sull'idrogeno. La facile gestione e 'scalability' dei processi a membrana e la semplicità e modularità degli impianti a membrana permette un veloce assemblaggio di qualsiasi impianto e una veloce risposta a particolari esigenze di separazione.

Moduli

Modulo: Nuovi materiali per produzione, purificazione e 'storage' di idrogeno
Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo - metallici
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Nuovi materiali per produzione, purificazione e 'storage' di idrogeno
Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Nuovi materiali per produzione, purificazione e 'storage' di idrogeno
Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
354	121	364	0	839	234	719	167	N.D.	1240

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
5	6

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	1	2	3	0	0	0	0	1	7

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	2	3	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Modellistica chimica e sue applicazioni

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sezione di Perugia
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIANLUIGI CASALONE

Elenco dei partecipanti

Bizzarri Olivia	liv. VI	Indaco Giuseppina	liv. VII	Rocchi Paola	liv. V
Cartechini Laura	III	Mercuri Francesco	III	Vecchio Maria Grazia	II
De Angelis Filippo	III	Miliani Costanza	III	Vitillaro Giuseppe	II
Fantacci Simona	III				

Temi

Tematiche di ricerca

L'attività più rilevante da svolgere nell'ambito della caratterizzazione sperimentale riguarda lo studio mediante diffrazione di raggi X di sistemi supramolecolari, l'implementazione dei metodi di simulazione degli spettri di risonanza paramagnetica elettronica e la messa a punto di tecniche spettroscopiche per lo studio di materiali di interesse nel campo dei beni culturali. Nel settore della modellistica computazionale l'attività riguarda l'implementazione di codici di chimica computazionale su piattaforme ad alte prestazioni e il loro utilizzo per lo studio dei sistemi in esame.

Stato dell'arte

La modellistica molecolare è uno strumento d'indagine usato in modo massiccio nella chimica, nella fisica, nella biologia e nella scienza dei materiali in quanto consente di descrivere un sistema chimico (molecole, supramolecole, nanosistemi) in modo completo attraverso la simulazione e la determinazione di alcune sue proprietà fondamentali quali la struttura geometrica, l'energetica e il comportamento reattivo.

Azioni

Attività da svolgere

Caratterizzazione strutturale e reattività di sistemi di interesse nel campo della chimica atmosferica; reattività di frammenti inorganici e organometallici di interesse in catalisi; modelli e simulazioni delle proprietà funzionali di sistemi molecolari, cluster e nanosistemi; studio delle proprietà relativistiche di sistemi contenenti metalli pesanti; spettroscopie di risonanza magnetica elettronica per lo studio di materiali nanostrutturati; sviluppo e messa a punto di tecniche spettroscopiche non distruttive e portatili per lo studio di materiali di interesse storico-artistico.

Punti critici e azioni da svolgere

Il pieno raggiungimento degli obiettivi previsti richiede ulteriori risorse di calcolo e la acquisizione di nuove unità di personale.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze del personale CNR e di quello universitario associato sono eccellenti come testimoniato anche dalla partecipazione a progetti europei e nazionali. Il know-how esistente è competitivo ed adeguato alla sfida internazionale, pur sussistendo una sofferenza di massa critica. Nell'ambito della modellistica chimica, il personale coinvolto nella presente commessa ha grande esperienza riconosciuta a livello internazionale sia nel settore della modellistica teorica occupandosi di sviluppo di algoritmi e programmi per il calcolo ad alte prestazioni in scienze molecolari sia in quello della modellistica sperimentale occupandosi di modelli per spettroscopie avanzate. In particolare il personale CNR e quello universitario associato ha alte competenze nello sviluppo e nell'applicazione di tecniche non distruttive e portatili, indispensabili per un'analisi in situ di un'opera d'arte.

Collaborazioni (partner e committenti)

Alcune delle attività di ricerca sono svolte in collaborazione con gruppi di altissimo livello scientifico riconosciuto in campo internazionale. Tra essi ricordiamo in particolare l'Università di Aarhus, Danimarca; il Politecnico di Milano, Italia; il NASA Ames Research Center di Moffett Field, California, USA; l'Università di



Heidelberg, Germania; l'Università di Princeton, USA; l'Università di Amsterdam, Olanda; l'Università di Melbourne, Australia e il Politecnico di Zurigo, Svizzera.

Finalità

Obiettivi

Obiettivo generale è simulare le proprietà e predire il comportamento di sistemi molecolari di rilevante interesse chimico e di viva attualità al fine di progettare sistemi molecolari con le proprietà desiderate. In particolare nel campo della modellistica teorica l'attività di ricerca è finalizzata a: (i) Determinazione di proprietà molecolari mediante calcolo delle strutture elettroniche; (ii) Modelli e simulazioni del comportamento collettivo di sistemi molecolari in fase condensata; (iii) Modelli e simulazioni delle proprietà funzionali di sistemi molecolari, cluster e nanosistemi. Nel settore della modellistica sperimentale obiettivo principale è l'analisi e lo studio di materiali di interesse nel campo dei beni culturali, effettuato tramite sofisticate tecniche spettroscopiche non distruttive e portatili.

Risultati attesi nell'anno

Nell'ambito della modellistica teorica si prevedono risultati di rilievo soprattutto nella determinazione della struttura elettronica di vari sistemi molecolari, cluster e nanosistemi; nella dinamica di processi catalitici; nello studio dei meccanismi di reazione nella chimica dell'atmosfera; nello studio delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche di materiali ibridi; nello studio di proprietà relativistiche. Nell'ambito della modellistica sperimentale si prevede la messa a punto di ulteriori tecniche spettroscopiche di analisi non distruttive e portatili.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

La modellistica chimica è in grado di dare un contributo fondamentale a qualunque settore della progettazione molecolare, consentendo una più approfondita conoscenza dei processi chimici implicati.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo: Modellistica chimica e sue applicazioni
Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Perugia

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
419	57	239	0	715	202	498	89	N.D.	1006

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
7	10

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
3	3	1	2	0	2	0	0	1	12

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	3	0	3

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Materiali porosi per la catalisi industriale

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ELVIO SEMPRINI

Elenco dei partecipanti

liv.

liv.

liv.

Temi

Tematiche di ricerca

Le tematiche di ricerca sono lo studio dell'interazione tra centri attivi di un catalizzatore e molecole organiche effettuato attraverso simulazione molecolare, sulla cui base sviluppare nuovi catalizzatori per processi industriali. Gli studi perseguiranno i seguenti obiettivi: 1) sviluppo di catalizzatori non contenenti metalli preziosi per ring opening di LCO con conseguente aumento del numero di cetano; 2) sostituzione degli acidi minerali nei processi industriali; 3) abbattimento VOC in impianti industriali; 4) catalizzatori per produzione di idrogeno; 5) catalizzatori per reazioni Fischer Tropsch (F-T); 6) produzione di energia da biomasse; 7) reattoristica e processi per produzione di fine chemicals, 8) recupero di energia e/o monomeri da plastiche. Per quanto riguarda i catalizzatori la ricerca sarà indirizzata a: 1) sintesi di argille, zeoliti e zeotipi come tali e dopati con metalli di transizione e non; 2) modifica dei precedenti tramite pilastramento, ristrutturazione, folding e wet impregnation con metalli di transizione e non; 3) sintesi di ossidi di metalli porosi; 4) formulazione degli stessi in pellets, monoliti e foams. 5) scale-up dei catalizzatori di cui sopra

Stato dell'arte

L'industria delle raffinerie di petrolio si trova di fronte a un terribile scommessa per esaudire da un lato la domanda di un sempre maggiore consumo di energia e dall'altra per ottemperare a disposizioni di salvaguardia dell'ambiente che diventano di giorno in giorno più stringenti. A ciò si aggiunga la necessità sempre maggiore di adoperare le frazioni più pesanti della distillazione del petrolio. Tutto ciò comporta la necessità di trovare nuovi catalizzatori per cracking e/o hydrocracking che abbattano contemporaneamente le sostanze inquinanti (composti solforati, ecc.) E' stato trovato che il cracking dei composti solforati contenuti in una nafta dipende dalle proprietà del catalizzatore, quali ad esempio la sua acidità di Lewis. Per superare questi ostacoli si può anche pensare di sviluppare produzioni di energia da fonti più pulite (biomasse, F-T, idrogeno, ecc.). L'utilizzazione dei materiali da riciclare non può essere solo diretta alla produzione di energia, perché in alcuni casi possono ottenersi prodotti chimici di notevole valore.

Azioni

Attività da svolgere

1. Studio delle interazioni tra centri attivi di un catalizzatore ed una molecola organica (simulazione molecolare). 2. Sintesi dei catalizzatori: sintesi di zeoliti, zeotipi, argille; ristrutturazione e pilastramento delle argille; scambio dei materiali sintetizzati o modificati con metalli di transizione o non; sintesi di ossidi metallici porosi. 3. Caratterizzazione dei catalizzatori di cui al punto 2 (diffrazione, spettrometria UV-Vis, FTIR, AA, porosimetria, AFM, Sans). 4. Test catalitici (fast testing). 5. Sulla base dei risultati ottenuti al punto 4, scale-up del catalizzatore, disegno del processo e del reattore. 6. Assemblaggio del reattore pilota. 7. Test sul reattore pilota. 8. Ottimizzazione dei parametri catalitici.

Punti critici e azioni da svolgere

In attesa dell'acquisizione di un fast testing apparatus il punto critico, a parte il consumo di tempo, è la perfetta riproducibilità dei test catalitici condotti singolarmente. Ossidazione selettiva di alcoli ad aldeidi. Dimerizzazione di alcani/alcheni mediante acidi solidi. L'acquisizione di una nuova GC-MS aumenterebbe le possibilità di analisi prodotti sia quantitativamente che qualitativamente. Esiste inoltre la necessità di acquisire un'unità di personale ricercatore, di un tecnologo e di un tecnico da dedicare rispettivamente al potenziamento delle attività di analisi GC e fast testing, di caratterizzazione, e di controllo dell'impianto pilota.



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Competenze: chimica-fisica, chimica supramolecolare, progettazione molecolare, chimica di superfici ed interfacce. Tecniche di caratterizzazione: diffrazione X-ray, spettrometria UV-Vis, FTIR, AA, porosimetria, AFM, SANS, TG-DTA. Tecnologie: sintesi idrotermale, impianti catalitici ad alta pressione, testing on-line e off-line; GC-MS.

Collaborazioni (partner e committenti)

Sintesi materiali porosi: Ceramiques Techniques Industrielles SA, Francia; IKO-Erbsloh, Germania; S&B, Grecia; Tolsa SA, Spagna; BENSC, Germania; PAN, Polonia; Surrey University, UK; Univ. Antwerp, Belgio; CNRS, Francia. Applicazioni catalitiche: Cepsa, Spagna; ENI, Italia; Saras Ricerche, Italia; BP Chemicals, UK; Repsol, Spagna; Statoil, Norvegia; Optatech Oy, Finlandia; KTH, Svezia; IRC Lyon, Francia; NCSR Demokritos, Grecia; SINTEF, Norvegia; Univ. Stuttgart, Germania; Univ. Delft, Paesi Bassi; Univ. Lipsia, Germania; Univ. Hannover, Germania; TNO, Paesi Bassi; CSIC, Spagna, CPERI, Grecia. Adsorbimento: CEMA Impianti, Italia; Air Liquide, Francia; Universidad de Alicante, Spagna; Certech, Belgio; ENEA, Italia. Simulazione molecolare: Imperial College, UK.

Finalità

Obiettivi

Aumento del numero di cetano in diesel da LCO a 55. Sintesi di catalizzatori superacidi in grado di sostituire gli acidi minerali nei processi industriali. Processi di abbattimento di VOC a livello di < 5 ppm in ambienti di lavoro industriali. Sviluppo di catalizzatori per sistemi di produzione di idrogeno. Sviluppo di catalizzatori per F-T. Produzione di energia da biomasse, mediante messa a punto di processi di micronizzazione e di cracking su solidi. Nuovi catalizzatori e sviluppo di reattoristica e processi per produzione di fine chemicals. Riciclaggio di materie plastiche (90%) con recupero di energia e/o monomeri.

Risultati attesi nell'anno

Standardizzazione per il cracking di materie plastiche: sistemi di micronizzazione e mixing. Determinazione dei parametri catalitici per diversi tipi di polimeri. Definizione delle procedure standard di laboratorio per abbattimento VOCs in round robin con altri 10 laboratori europei. Ulteriore sviluppo sistemi per ring opening e aumento n cetano in LCO; Testing per la sostituzione di acidi minerali in processi industriali; Proseguimento della sintesi di catalizzatori per sistemi produzione H₂; Catalizzatori per F-T; Messa a punto di sistemi per produzione di energia da biomasse; Reattoristica e processi per produzione di fine chemicals.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Industria petrolchimica: idrogenazione LCO, cracking di heavy feeds. Industrie produttrici di energia: produzione di energia da biomasse, produzione di idrogeno. Industria chimica: F-T, produzione di fine chemicals. Industrie del recupero: recupero di solventi, recupero dei monomeri da materie plastiche.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Miglioramento della qualità dei combustibili. Sostituzione delle lavorazioni pericolose con acidi minerali con acidi solidi. Miglioramento della qualità dell'ambiente lavorativo (tintorie, carrozzerie, verniciatori, ecc) attraverso l'adsorbimento dei solventi.

Moduli

Modulo: Materiali porosi per la catalisi industriale
Istituto esecutore: Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
0	120	85	0	205	35	240	119	N.D.	359

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo *</i>	
ricercatori	Totale
7	10

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	4	1	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione e caratterizzazione di sistemi nano-organizzati e di strutture a membrana micro e meso porosa, immobilizzanti reagenti, sorbenti, catalizzatori, e fotocatalizzatori, per applicazioni ambientali

Dati generali

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	RICCARDO BIANCHI

Elenco dei partecipanti

liv.

liv.

liv.

Tem

Tematiche di ricerca

Le attività hanno comportato, da parte di Enti, pubblici e privati, che collaborano alla presente commessa, la progettazione, l'utilizzo e la caratterizzazione di strutture a membrana reattiva, ossia di membrane immobilizzanti reagenti chimici, sorbenti, catalizzatori, e fotocatalizzatori. La sintesi di tali membrane è stata per lo più compiuta utilizzando nanotecnologie di copolimerizzazione mediante fotoinnesto su strutture macromolecolari micro e meso porose, ma anche di innesto su strutture a membrana ceramica o metallica. I metodi di sintesi sono stati brevettati da parte di Enti privati, responsabili della R&S relativa. Lo scopo generale è stato ed è quello di realizzare reattori modulari immobilizzanti reagenti e/o catalizzatori. Ulteriori sviluppi sono ora attesi sia dalla sintesi e dalla modellizzazione fisico -matematica di fotocatalizzatori ossidici convenientemente drogati e aventi morfologia mesoporosa, immobilizzati in membrana, sia da membrane immobilizzanti reagenti e/o catalizzatori, e/o sorbenti, e/o fotocatalizzatori.

Stato dell'arte

L'impatto dei processi a membrana, nel campo delle separazioni, per le applicazioni della grande industria è ben noto. L'impiego di membrane reattive, nel significato sopra ricordato, invece, è assai meno diffuso, soprattutto per le difficoltà sinora incontrate nella sintesi di tali tipi di membrane. In questo settore, infatti, la metodologia prevalentemente impiegata è quella di accoppiare un reattore di tipo tradizionale ad un processo a membrana, perdendo così l'enorme vantaggio che i processi a membrana consentono, e soprattutto quello della modularità. La particolare tecnologia di sintesi messa a punto con le nanotecnologie di innesto e fotoinnesto sopra citate, per contro, consente di realizzare veri reattori a membrana, in cui la cinetica del processo si gioca esclusivamente all'interno della struttura a membrana, come per l'appunto avviene nei processi di separazione. E' così possibile realizzare reattori perfettamente modulari, come rientra nelle ambizioni dell'ingegneria chimica più avanzata, quali i reattori impiegati negli impianti pilota pre - industriali sopra richiamati.

Azioni

Attività da svolgere

Riprendendo pregresse competenze e know how, si desidera ora estendere la messa a punto e l'utilizzo delle membrane reattive, fotoreattive e fotocatalizzatrici sia nel campo ambientale, che in campi diversi da quello strettamente ambientale, come ad es. nel campo della reatoristica chimica. Lo scopo generale del progetto è infatti quello di modellizzare una metodologia innovativa per condurre le reazioni chimiche, immobilizzando reagenti e sorbenti in una struttura a membrana micro e meso porosa.

Punti critici e azioni da svolgere

Gli aspetti critici riguardano anzitutto la necessità di coprire i costi, oltre che la proprietà intellettuale, degli enti privati, produttori delle membrane immobilizzanti reagenti, sorbenti, e catalizzatori o fotocatalizzatori, che ne sono titolari, e poi la disponibilità di personale idoneo da dedicare all'attività sperimentale e modellistica, disponibilità che deve rendersi possibile nell'ambito del presente progetto, come condizione indispensabile al suo svolgimento



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi e caratterizzazione di membrane piane immobilizzanti reagenti chimici, sorbenti, catalizzatori, fotocatalizzatori. Per quanto riguarda le applicazioni della fotocatalisi, si utilizzano sia membrane immobilizzanti fotocatalizzatori commerciali, sia membrane utilizzando fotocatalizzatori sintetizzati in laboratorio con metodo sol - gel assistito da templante o con metodo idrotermale, con controllo di struttura (SEM, TEM, ESR), sia membrane immobilizzanti fotocatalizzatori commerciali, con additivazione di fotopromotori, con azione di scavenger o di estensione del band gap, durante la sintesi delle membrane stesse. Le membrane vengono caratterizzate sotto il profilo fotocatalitico mediante modelli fisico - matematici idonei a riprodurre le curve sperimentali della mineralizzazione completa degli inquinanti organici, nonché a determinare con accuratezza i parametri di interesse per la progettazione dei reattori, ivi compresi i rendimenti quantici, in funzione della concentrazione degli inquinanti e dei flussi fotonici, punto chiave di tutte le applicazioni della fotocatalisi, che si propongono di divenire commercialmente competitive.

Collaborazioni (partner e committenti)

Le tematiche più salienti, svolte in collaborazione con l'Università di Milano Bicocca, con il Centro di Ricerca per l'Ambiente e l'Impresa dell'Università di Milano, con il Politecnico di Bucarest, con Istituti di ricerca e cura a carattere scientifico, e con Laboratori di ricerca di Aziende private, attraverso apposite convenzioni, riguardano progetti di ricerca finanziati dal MIUR, dalla Regione Lombardia, dalla Fondazione Cariplo, e da altri Enti privati.

Finalità

Obiettivi

Gli obiettivi in corso di realizzazione riguardano, per quanto concerne la fotocatalisi, la sintesi, la caratterizzazione delle membrane, e l'utilizzo di tali membrane in impianti pilota i) per implementare impianti di condizionamento, realizzando la depurazione, e la sanificazione integrale dell'aria in pubblici esercizi (ad es. sale fumatori) od in strutture ospedaliere, ii) per la mineralizzazione integrale di inquinanti organici nelle acque reflue, con riutilizzo dell'acqua di processo, iii) per l'induzione di biodegradabilità integrale in acque reflue contenenti agenti tossici e non biodegradabili, allo scopo di utilizzare poi in cascata impianti a fanghi attivi, iv) per la produzione di acqua ultrapura nell'industria microelettronica, elettronica, e farmaceutica.

Risultati attesi nell'anno

Preparazione di membrane opportunamente modificate e/o funzionalizzate, sia per gli scopi fotocatalitici (in particolare per l'impiego di fotocatalizzatori ossidici convenientemente additivati di fotopromotori e sensibilizzatori), sia per gli scopi reattoristici più in generale (membrane reattive, membrane sorbenti, membrane immobilizzanti catalizzatori). Gli esempi che verranno scelti per il primo anno riguarderanno: depurazione di acqua ed aria da microinquinanti organici, nel range 1-1000 ppm di carbonio organico; produzione di acqua ultrapura (TOC inferiore a 0,1 ppb); trasformazione di reflui tossici in reflui interamente biodegradabili; processi fotocatalitici per il riutilizzo di acque nell'industria agroalimentare; desolfurazione di fumi di centrali termoelettriche.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Reattori a membrana sono stati saggiati sia a livello di laboratorio, che a livello pre-industriale su impianti pilota, nei seguenti processi: 1) processi fotocatalitici per la depurazione di aria ed acqua da microinquinanti organici, 2) produzione di acqua ultrapura (con tenore di carbonio organico inferiore a 0,1 ppb), 3) processi fotocatalitici per la trasformazione di reflui tossici in reflui integralmente biodegradabili, 4) processi fotocatalitici per il riutilizzo di acque reflue dell'industria agro-alimentare, 5) processi di desolfurazione dei fumi di centrali termoelettriche. Per quanto riguarda le applicazioni ambientali della fotocatalisi, oltre all'avanzamento notevole già arrecato mediante l'immobilizzo di fotopromotori, ulteriori sviluppi sono ora attesi dalla sintesi di fotocatalizzatori ossidici convenientemente drogati e aventi morfologia mesoporosa. Per quanto riguarda le applicazioni future, ulteriori sviluppi delle membrane immobilizzanti reagenti e/o sobenti potranno essere indirizzati alle tecnologie di reazione in reattori modulari, in particolare nei reattori a membrana reattiva od a membrana catalitica.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

L'utilizzo di processi a membrana fotocatalitica rappresenta notoriamente quanto di più avanzato vi sia nei processi di ossidazione avanzata, per applicazioni ambientali (depurazione di acqua ed aria). In questo campo, inoltre, l'utilizzo di membrane funzionalizzate potrà realizzare un notevole avanzamento anche nella reattoristica chimica più progredita (reattori modulari), oltre che contribuire ad una maggior rispetto dell'ambiente e quindi, in definitiva, alla qualità della vita.



Moduli

Modulo: Progettazione e caratterizzazione di sistemi nano-organizzati e di strutture a membrana micro e mesoporosa per applicazioni ambientali

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
0	6	0	0	6	0	6	0	N.D.	6

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
7	10

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	1	1

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



**Progettazione di strutture molecolari -
supramolecolari - macromolecolari e di
sistemi nanoorganizzati con proprietà
elettriche, fotoniche o magnetiche**



Materiali Polimerici Compositi e Nanostrutture per Optoelettronica, Fotonica e Relativi Dispositivi

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio delle macromolecole
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ALBERTO BOLOGNESI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Armanini Marco Gabriele	IV	Catellani Marinella	II	Piovani Daniele	V
Bergamini Natalina	V	De Salvia Elisabetta	VI	Porzio William Umberto	II
Bolognesi Alberto	II	Destri Silvia Maria	II	Provasoli Francesco	IV
Bonassi Palmira	IV	Giacometti Schieroni	V	Pucci Valeria	VII
Botta Chiara	III	Alberto		Secondi Pietro	IV
Cam Davy	VII	Italia Salvatore	V	Tarchi Francesca	VII
Canetti Maurizio	IV	Izzo Mario	VII		
Castoldi Elena	VII	Luzzati Silvia	III		
		Mendichi Raniero	III		
		Pasini Mariacecilia	III		

Temi

Tematiche di ricerca

-Modelling, processi di sintesi di monomeri/polimeri per l'elettronica, optoelettronica e fotonica, ottimizzazione protocolli di polimerizzazione -Caratterizzazione molecolare (GPC, NMR), strutturale, elettroottica, termica, metodologie di caratterizzazione molecolare -Architetture supramolecolari nanometriche -Dispositivi optoelettronici a diversa architettura per emissione di luce, conversione luce/corrente, modulazione corrente- Polimeri superstrutturati per sensori molecolari -Polimeri per microelettronica -Dispositivi per fotonica, ottica non-lineare

Stato dell'arte

L'industria microelettronica rappresenta una fetta consistente dell'economia globale. In questo settore, in continua evoluzione, c'è una forte domanda di nuovi materiali con migliorate prestazioni, con processing a basso costo basato sull'auto-organizzazione su scala nanometrica per prodotti dalle funzioni innovative. I polimeri coniugati, a basso ed alto peso molecolare, rispondono a queste esigenze e trovano già impiego in numerosi settori della microelettronica avanzata. La ricerca di nuovi materiali con migliorate prestazioni è una necessità continua per realizzare dispositivi avanzati.

Azioni

Attività da svolgere

1) Modellazione e sintesi dei materiali: polimeri coniugati a basso/alto peso molecolare per applicazioni in optoelettronica, fotonica, microsistemi 2) Caratterizzazione molecolare, strutturale, elettrica, spettroscopica ottica ed ottica non lineare dei materiali 3) Organizzazione dei materiali in strutture supramolecolari nanorganizzate semplici o complesse con differenti tecniche 4) Realizzazione e test di prototipi di dispositivi e/o microsistemi

Punti critici e azioni da svolgere

I punti critici: -Stabilità nel tempo dei materiali preparati: questa non è ancora prevedibile, con sufficiente precisione, a priori -Scarso controllo della dispersione delle masse molecolari che può portare ad un basso livello di organizzazione supramolecolare Condizioni di fattibilità: -Rapido accesso al finanziamento ed alla reperibilità di borse di studio su cui attivare la commessa -Coordinamento con i gruppi con cui si intende collaborare

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Competenze: Modelling, Sintesi Chimica, Metodologie di deposizione di film organici, modifica di superfici. Tecnologie e tecniche d'indagine: Gel Permeation Chromatography, Misure elettriche, Spettroscopia



Elettroottica, Analisi termica, Controllo struttura supramolecolare, Microscopia ottica e confocale, Analisi strutturale con raggi X a basso/alto angolo

Collaborazioni (partner e committenti)

Partner: IMCB-CNR Napoli-ISTM-CNR Milano-Università di Bari-Politecnico di Milano (Dip Fisica, Elettronica, Chimica)-ISOF-CNR Bologna-ISMN-CNR Bologna-Università di Genova Dip Chimica Industriale-Università di Linz/Gratz-ISF-CNR Trento-Università di Napoli
Committenti: MIUR-Comunità Europea-Fondazione Cariplo

Finalità

Obiettivi

Obiettivi i) Sintesi di nuovi polimeri coniugati ad alto o basso peso molecolare con proprietà elettroottiche, fotoniche. ii) Caratterizzazione molecolare, strutturale, elettronica, ottica lineare e non, elettrica iii) Organizzazione delle strutture molecolari a basso/alto peso molecolare in strutture supramolecolari a morfologia controllata iv) Prototipi di dispositivi optoelettronici e microsistemi

Risultati attesi nell'anno

i) Modelli di strutture polimeriche e/o copolimeriche ii) Nuovi materiali polimerici e copolimerici a basso e alto peso molecolare con migliorate proprietà elettroottiche, fotoniche, elettriche, termiche iii) Film sottili con nuove architetture supramolecolari nano/microorganizzate per la preparazione di dispositivi optoelettronici e fotonici. iv) Preparazione e testing di dispositivi optoelettronici, fotonici e microsistemi con diversa architettura

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Questi materiali rispondono alla necessità di sostituire le tecniche di lavorazione dei materiali inorganici tradizionali, già utilizzati in elettronica, con tecniche più semplici e a minor costo.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

I materiali possono essere impiegati nell'industria microelettronica in concorrenza con i materiali semiconduttori tradizionali o in nicchie di applicazioni: sensoristica, display, illuminatori, illuminatori per automotive, pannelli illuminanti per arredamento, telecomunicazioni, dispositivi.

Moduli

Modulo: Materiali Polimerici Compositi e Nanostrutture per Optoelettronica, Fotonica e Relativi Dispositivi

Istituto esecutore: Istituto per i materiali compositi e biomedici

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Materiali Polimerici Compositi e Nanostrutture per Optoelettronica, Fotonica e Relativi Dispositivi

Istituto esecutore: Istituto per lo studio delle macromolecole

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Materiali per elettronica molecolare e optoelettronica

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
639	371	193	0	1203	79	643	183	N.D.	1465

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
7	14

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	1	0	9	0	0	0	0	0	10

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	20	9	30

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Nanotecnologie di materiali multifunzionali

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Sede principale svolgimento:	Bologna
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	FABIO BISCARINI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Balestri Maria Grazia	V	De Cinti Francesca	VI	Moretto Luciano	IV
Biscarini Fabio	III	De Fazio Daniela	VII	Ponzi Bruna	VIII
Cacace Giuseppe Marcello	II	De Santis Giuseppe	VIII	Rossi Franca	VI
Cianfanelli Maria Claudia	VIII	Favero Laura	III	Sensini Rosano	VII
Ciccarelli Elisabetta	VI	Ianni Grazia	VIII	Silenzi Patrizia	VII
Cimini Cristiana	VI	Matacotta Francesco Cino	II	Zaccaria Francesca	VIII
Cirone Anna Maria	V	Mei Paolo	VI	Zecchi Patrizia	IV

Temi

Tematiche di ricerca

NANOSTRUTTURAZIONE: patterning di semiconduttori e dielettrici organici in 0-3D; dewetting di film sottili; auto-organizzazione supramolecolare di rotassani; patterning di DNA e peptidi. **NANOFABBRICAZIONE:** processi di deposizione e crescita assistiti da stampi e templati; microfluidica. **DISPOSITIVI:** transistor organici a film ultra-sottile e a base di nanostrutture autorganizzate; biosensori a base di nanotubi di carbonio; fotovoltaico organico; trasduttori elettrici per processi dinamici in biosistemi. **SVILUPPO DI TECNOLOGIA:** costruzione di UHV-LT AFM; misure elettriche e magnetiche con sonde locali a scansione in ambiente e alto - vuoto; strumenti e robot per nanofabbricazione. **PROPRIETA':** fenomeni dinamici di sistemi complessi; iniezione di carica in dispositivi organici; trasporto attraverso strati monomolecolari.

Stato dell'arte

Le nanotecnologie hanno come obiettivo lo sviluppo di dispositivi e sistemi funzionali le cui proprietà sono controllate attraverso le dimensioni caratteristiche dei materiali su scala nanometrica. Materiali multifunzionali (molecole; polimeri; biomolecole; nanoparticelle e cluster) progettati per l'auto-assemblamento possono essere utilizzati in processi di nanofabbricazione bottom-up. Occorre sviluppare una piattaforma tecnologica per fabbricare nuovi prodotti e sviluppare applicazioni sostenibili.

Azioni

Attività da svolgere

Nanomateriali: semiconduttori organici; nanosfere, nanotubi di carbonio (CNT); superfici funzionalizzate per riconoscimento biomolecolare; moti molecolari governati da interazioni non covalenti. **Nanofabbricazione:** integrazione di nanostrutture in dispositivi; ossidazione anodica parallela; crescita su templati; microfluidica; scaffolds per crescita cellulare. **Dispositivi:**FET a film sottile e a fibrille; fotovoltaico; dispositivi ibridi biologico/organico integrati con microfluidica; trasduttori per dinamica di sistemi biologici. **Strumentazione:** UHV-STM/AFM a VT, HV-AFM in modi EFM, MFM, SKPM; misure elettriche in HV; Spettrometri MW per fasci supersonici.

Punti critici e azioni da svolgere

1) Messa in funzione del ciclo completo di prototipazione matrici e stampi; 2) EBL a risoluzione sotto i 50 nm; 3) messa in funzione di un laboratorio in grado di accogliere cellule; 4) messa in opera di una clean room per fabbricazione e tecnologia; 5) integrazione di personale con preparazione biologica nella commessa. 6) dimostrazione dell'integrazione di microfluidica e dispositivi elettronici.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Competenze: chimica-fisica, chimica supramolecolare, elettrochimica, progettazione molecolare, chimica di superfici ed interfacce; fisica dello stato solido, fisica molecolare, biofisica, microscopia, diffrazione, ingegneria elettronica, ingegneria informatica. **Tecnologie:** soft lithography, electron beam lithography, fotolitografia, crescita di film sottili organici in alto vuoto e per spin coating; microfluidica. **Tecniche di**



indagine: microscopie a scansione di sonda in ambiente, liquidi e alto vuoto; microscopia elettronica a scansione; microscopia a fluorescenza; misure elettriche su dispositivi e con sonde locali.

Collaborazioni (partner e committenti)

Materiali multifunzionali: CNR-ISOF, Univ. Libre Bruxelles, Techn. Univ. Eindhoven, KUNjmegeen, Max Planck Inst. Mainz, CSIC-ICMAB Barcelona, Univ. Cambridge, Avecia, Merck, Univ. Firenze; INT-Karlsruhe. Transistor organici: Philips Res. Labs. Eindhoven, STMicronics Catania, Univ. Wuerzburg, IMEC Leuven Prototipazione: ST, INFEM-S3 MO, INFEM-TASC TS, INFEM-NNL LE; Università della Magna Grecia. Spintronica: CNEA Strumentazione: UNIBO, SACMI, CSIC Madrid Misure strutturali: CNRS Strasbourg, Risoe Denmark, UNIBO Modeling: UNIBOSistemi biologici: LMUniversitaet Munich; UNIPi; UNITS; UNIUD; Univ. of Bristol; Hungarian Academy of Sciences. Committenti: European Commission; European Science Foundation; MIUR-FIRB; Regione Emilia-Romagna.

Finalità

Obiettivi

NANOSTRUTTURAZIONE: controllo spaziale di materiali multifunzionali su superfici e in ambienti confinati. NANOFABBRICAZIONE: sviluppo di processi sostenibili, prototipazione. DISPOSITIVI: nanofabbricazione di transistor organici, bio-sensori, memorie. SVILUPPO DI TECNOLOGIA: a) strumentazione per caratterizzazione e fabbricazione; b) piattaforma tecnologica. PROPRIETA' DI MATERIALI: fenomeni dinamici su scale molecolari, nanometriche e mesoscopiche. Formazione di competenze multidisciplinari in giovani ricercatori. Valorizzazione della proprietà intellettuale generata e trasferimento tecnologico (creazione di spin-off).

Risultati attesi nell'anno

NANOSTRUTTURAZIONE: fibrille, strisce, nanosfere; film ultrasottili di dielettrici; biomolecole; cellule cresciute su pattern molecolari; NANOFABBRICAZIONE: attività di prototipazione per EBL a regime; microfluidica con controllo dimensionale sotto i 200 nm. DISPOSITIVI: transistor organici a mobilità > 1 cm²/Vs; biosensori con CNT; fotovoltaico a base di miscele binarie di sfere decorate. SVILUPPO DI TECNOLOGIA: misure con UHV-VT AFM; misure elettriche in situ, caratterizzazione di dispositivi micro- e nanometrici in ambiente controllato. PROPRIETA': energetica, struttura ed interazioni in sistemi molecolari; trasporto di carica a singola molecola.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- meccanica di precisione- packaging- elettronica organica- bio-diagnostica- coltivazione di cellule- drug-delivery.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

- sensoristica integrata;- tracciabilità di prodotti agro-alimentari e farmaceutici;- sistemi per anti- contraffazione, sicurezza, anti-terrorismo;- diagnostica patologica;- neurologia; - genomica e proteomica; - medicina rigenerativa.

Moduli

Modulo: Nanotecnologie di materiali multifunzionali
Istituto esecutore: Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Caratterizzazione strutturale e funzionale di nanostrutture ibride organico/inorganico
Istituto esecutore: Istituto di struttura della materia
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
345	240	1174	0	1759	513	1927	338	N.D.	2610

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
4	7

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	1	0	3	2	0	0	0	1	7

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
3	2	9	14

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



MAteriali Funzionali Organici per applicazioni High-Tech: sistemi molecolari, supramolecolari e bioibridi (MAFO-HT)

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIOVANNA BARBARELLA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Barbarella Giovanna	II	Destro Pierina	IV	Roda Silvana	IV
Bimondo Arturo	II	Favaretto Laura	V	Samori Paolo	III
Bonato Giuseppina	VIII	Geri Alessandro	IV	Sitran Sergio	III
Camaioni Nadia	III	Chirardelli Maurizio	VIII	Sotgiu Giovanna	III
Capobianco Massimo	III	Giorgianni Patrizia	IV	Tamburini Sergio	II
Cardone Antonio	III	Giustiniani Carla	VII	Venturini Alessandro	III
Chiodini Roberta	VIII	Hassan Omar Omar	III	Vigato Pietro Alessandro	I
Cicco Stefania Roberta	III	Lughi Daniela	VI	Zambianchi Massimo	V
Cortesi Roberto	VII	Manderioli Anita	IV	Zambolin Claudia	VII
Degli Esposti Roberto	IV	Rafaschieri Angela	VII	Zanelli Alberto	III

Temi

Tematiche di ricerca

1) Modellistica molecolare e simulazioni 2) Sintesi di materiali organici coniugati 3) Sintesi di materiali funzionali di ispirazione biologica 4) Sviluppo di metodologie per la preparazione di micro e nanostrutture funzionali. 5) Caratterizzazioni strutturali 6) Caratterizzazioni funzionali 7) Self-assembly nello stato solido 8) Sviluppo di metodologie per la marcatura fluorescente di biopolimeri

Stato dell'arte

Lo sviluppo di materiali organici capaci di esercitare funzioni quali il trasporto di cariche elettriche o l'emissione di luce richiede la sintesi di strutture molecolari variamente complesse e il controllo delle loro proprietà di autoorganizzazione. Il dominio dei processi che consentono l'espressione di una certa funzione nello stato solido (condizione in cui operano i dispositivi a base organica) è attualmente il focus della ricerca internazionale sui materiali multifunzionali.

Azioni

Attività da svolgere

Calcoli teorici relativi a proprietà singole e collettive di composti organici Sintesi di oligomeri e polimeri coniugati, di composti metallorganici e di biopolimeri Caratterizzazioni chimiche e strutturali, inclusi metodi diffrattometrici e microscopie a scansione Fabbricazione di prototipi di dispositivi per caratterizzazioni elettriche ed elettroottiche Marcatura di biopolimeri con molecole fluorescenti

Punti critici e azioni da svolgere

Maggior punto critico è l'incertezza di risorse umane e finanziarie. Il gruppo già si procura molte risorse attraverso la partecipazione a progetti di ricerca nazionali ed internazionali. Impossibile, però, sopperire a bisogni quali strumentazione di rilievo soltanto attraverso l'accesso a progetti limitati nel tempo. È inoltre impensabile che la ricerca possa essere condotta con profondità e continuità solo con personale precario e contratti a breve termine.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

La commessa riunisce competenze in: calcolo teorico e simulazioni, sintesi organica e metallorganica, sintesi di micro e nanostrutture funzionali, caratterizzazioni strutturali e funzionali di materiali organici in film sottili. La commessa ha a disposizione laboratori di sintesi equipaggiati con la strumentazione atta a caratterizzare nuove molecole, complessi e polimeri (risonanza magnetica multinucleare, spettrometria di massa, cromatografia a esclusione, spettroscopia IR, UV e PL, dicroismo circolare, strumentazione per caratterizzazione elettrochimica, etc...). Sono presenti inoltre competenze in calcolo computazionale, elaboratori elettronici con singolo o doppio processore per modellistica molecolare e software scientifico per



calcoli ab-initio; apparecchiature ed expertise per la diffrazione a raggi-X di cristalli singoli e film sottili, per caratterizzazioni strutturali multiscala attraverso microscopie a scansione e per la caratterizzazione delle proprietà elettriche ed elettroottiche di materiali funzionali organici attraverso la fabbricazione di prototipi di dispositivi (sensori, FET, LED, PVD).

Collaborazioni (partner e committenti)

Istituti Area di Ricerca CNR di Bologna Dipartimento CNR Materiali e Dispositivi Partners internazionali progetti UE Univ. Bologna, Dip. Chimica G. Ciamician e Dip. Biotecnologie Univ. Piemonte orientale, Dip. Scienze e Tecnologie Avanzate Univ. Bari, Dip. di Chimica e di Fisica Istituto Superiore di Sanità Consorzio Interuniversitario Nazionale Metodologie e Processi Innovativi di Sintesi (CIMPIS) Industrie

Finalità

Obiettivi

Preparazione di: a) semiconduttori organici per applicazioni in campo (opto)elettronico e per la rivelazione fluorogenica o elettrica di biopolimeri b) materiali funzionali coniugati e bioibridi per studi di self-assembly nello stato solido. Competenze da utilizzare: esperienza in calcolo teorico/ sintesi organica e bioorganica/ caratterizzazione strutturale di cristalli, polveri e film organici/ caratterizzazione delle proprietà elettriche e (opto)elettroniche di film sottili

Risultati attesi nell'anno

Dopo 12 mesi: preparazione di semiconduttori organici p, n e ambipolari anche emettitori di luce; caratterizzazioni elettriche ed elettroottiche. Dopo 24 mesi: ottimizzazione delle relazioni struttura molecolare/ proprietà funzionali/ morfologia. Dopo 36 mesi: preparazione di semiconduttori bioibridi buoni trasportatori di carica; realizzazione di dispositivi per la rivelazione fluorogenica e/o elettrica di biopolimeri.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Nella commessa sono presenti numerose attività di trasferimento tecnologico alle imprese attraverso la partecipazione diretta dei gruppi di ricerca in progetti per lo sviluppo di prodotti e processi di interesse industriale. Le imprese interessate alle attività della commessa sono a carattere sia nazionale che internazionale ed operano principalmente nel settore dei sensori e dispositivi a base di materiali organici e delle nanotecnologie. Alcune attività della commessa sono inserite nel distretto High-Mech della regione Emilia-Romagna. Nella commessa è presente uno spin-off di ricerca a partecipazione CNR tradottosi nella creazione della società Meditekology srl. La società, ospitata nell' Area della Ricerca CNR di Bologna, sta sviluppando prodotti fluorescenti di sintesi da utilizzare per la rivelazione e il dosaggio di proteine e componenti del DNA. La società è stata fondata in collaborazione con il laboratorio NNL del Dipartimento Materiali e Dispositivi, il cui compito è quello di sviluppare un macchinario (citofluorimetro) da portare sul mercato insieme ai marcatori sviluppati nel quadro della commessa.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo:	MATERIALI FUNZIONALI ORGANICI per applicazioni High-Tech: sistemi molecolari, supramolecolari e bioibridi (MAFO-HT)
Istituto esecutore:	Istituto di chimica dei composti organo - metallici
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto
Modulo:	MATERIALI FUNZIONALI ORGANICI per applicazioni High-Tech: sistemi molecolari, supramolecolari e bioibridi (MAFO-HT)
Istituto esecutore:	Istituto di chimica inorganica e delle superfici
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto
Modulo:	MATERIALI FUNZIONALI ORGANICI per applicazioni High-Tech: sistemi molecolari, supramolecolari e bioibridi (MAFO-HT)
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
1024	378	112	10	1524	485	975	320	N.D.	2329

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
13	22

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
3	0	0	2	0	0	0	4	0	9

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	6	6	14

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Componenti molecolari, supramolecolari o macromolecolari con proprietà fotoniche ed optoelettroniche

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	SILVIO QUICI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Argazzi Roberto	III	Cavazzini Marco	III	Forni Alessandra	III
Armaroli Nicola	III	Chiorboli Claudio	I	Gatti Carlo Edoardo	II
Barbieri Andrea	III	Cocchi Massimo	III	Lucenti Elena	III
Barigelletti Francesco	I	Colombo Pietro	V	Mezza Giovanni	IV
Barzaghi Mario	II	Cortesi Roberto	VII	Minghetti Maurizio	VII
Bellini Maria	VII	D'Anna Maria Gioia	VI	Penotti Fabio Enrico	III
Berlin Anna	II	Dall'Olio Alessandra	VI	Pilati Tullio	II
Bianchi Riccardo	II	Degli Esposti Alessandra	III	Ponti Alessandro	III
Bradamante Silvia	II	Fattori Valeria	II	Prosperi Davide	III
Cargnoni Fausto	III	Filippini Giuseppe	II	Quici Silvio	I
Casalone Gianluigi	I	Flamigni Lucia	II	Soave Raffaella	III

Temi

Tematiche di ricerca

Progettazione e sintesi di molecole organiche policoniugate con risposte NLO fotomodulabili per memorie elettriche e ottiche riscrivibili o per NLO switches. Sintesi di sistemi eterociclici come gruppi elettronattrattori ed elettron-donatori capaci di emissione indotta per assorbimento di due fotoni (TPA). Sintesi di strutture dendritiche con cromofori fotonici da usare come collettori d'energia. Progettazione e caratterizzazione di: a) molecole o architetture complesse con proprietà emissive, basate su complessi metallici di lantanidi/ metalli di transizione; b) strutture bi- o tri-dimensionali funzionalizzate per provvedere un gradiente di energia elettronica o potenziale redox che consenta un trasferimento vettoriale fotoindotto di energia o di elettroni; c) fabbricazione e caratterizzazione di LED organici e di sistemi opto-elettronici ibridi a interfaccia organico-inorganico a film sottile; d) dispositivi elettrocromici basati su semiconduttori nanocristallini funzionalizzati.

Stato dell'arte

La progettazione e la sintesi di materiali funzionali nanostrutturati, (con proprietà ottiche ed elettriche) o multifunzionali, per autoaggregazione molecolare con perfetto controllo strutturale e funzionale 'bottom-up' è un campo di ricerca in continua espansione nei laboratori di tutto il mondo e costituisce un modo innovativo per lo sviluppo delle nanotecnologie e per la costruzione di dispositivi con dimensioni <100 nm difficilmente ottenibili mediante miniaturizzazione 'top-down'. L'indagine volta alla comprensione dei processi indotti in sistemi molecolari complessi dall'assorbimento di fotoni, è di enorme attualità e ha larghe potenzialità di ricaduta applicativa sia nello sviluppo di materiali innovativi che in quello della conversione dell'energia solare. Dispositivi molecolari di appropriata complessità e struttura possono infatti essere progettati per esibire funzioni predeterminate operate da stimoli luminosi o per utilizzare e convertire l'energia luminosa.

Azioni

Attività da svolgere

Progettazione e sintesi di composti organici, organometallici e di coordinazione con proprietà ottiche non lineari (del secondo e terzo ordine) e per assorbimento multifotonico e studio dell'attività in soluzione. Loro funzionalizzazione per la preparazione di materiali nanostrutturati mediante autoaggregazione e/o aggancio a polimeri solubili e reticolati. Sintesi di complessi di ioni lantanoidi con proprietà emissive e loro ancoraggio su superfici solide per ottenere dispositivi per elettro- e foto-emissione. Sintesi di complessi metallici e materiali organici per tecnologia OLED e fotovoltaica. Sistemi supramolecolari contenenti metalli di transizione per la conversione di energia. Preparazione di materiali funzionali basati su complessi mono e polinucleari di metalli di transizione per lo sviluppo di: nuovi sensibilizzatori spettrali; nuovi mediatori redox per celle fotoelettrochimiche rigenerative; sistemi eterosupramolecolari inorganici e metallorganici con



funzioni fotocromiche ed elettrocromiche; produzione fotoelettrochimica di idrogeno. Studio delle proprietà elettroniche di composti di interesse con i metodi DFT e TD-DFT.

Punti critici e azioni da svolgere

La fattibilità del progetto è strettamente correlata alla entità del finanziamento istituzionale che a sua volta determina la possibilità di implementare la strumentazione esistente e/o sostituire quella obsoleta con più moderne apparecchiature necessarie per la caratterizzazione chimica, strutturale e funzionale dei prodotti ottenuti. E' necessario mantenere un giusto bilancio tra le ricerche finalizzate richieste da contratti esterni e le ricerche che garantiscono la base culturale per lo sviluppo di idee e progetti innovativi e che consentono al gruppo di avere una posizione di prestigio in campo internazionale necessario per competere per i grossi progetti sia nazionali che europei. Non meno importante è la necessità di acquisire nuovo personale a tempo determinato e/o indeterminato. In mancanza di un adeguato reclutamento verranno compromesse definitivamente le competenze e potenzialità di lavoro del gruppo, sprecando le capacità e la preparazione di giovani capaci e perdendo per i prossimi pensionamenti l'esperienza accumulata.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

L'unità di ricerca ha competenze riconosciute a livello internazionale nel campo della modellizzazione molecolare e calcolo teorico, nel campo della sintesi e caratterizzazione strutturale e funzionale di molecole organiche, inorganiche e organometalliche e nella progettazione e studio con tecniche spettroscopiche di dispositivi molecolari e supramolecolari da impiegare nella fotonica e optoelettronica. Le apparecchiature a disposizione del gruppo coprono un ampio spettro di tecniche sperimentali come: Spettrometri NMR, MS, FTIR; Spettrometri per la caratterizzazione strutturale ai raggi X su cristallo singolo e su polveri; HPLC; EFISH (unico in Italia) per la misura delle proprietà NLO in soluzione e Kurtz-Perry per la misura delle proprietà NLO su polveri; tecniche elettrocromiche e tecniche di caratterizzazione di materiali polimerici (DSC, TGA, GPC); Laser flash fotolisi al nanosecondo, tempi di vita di emissione per conteggio di singoli fotoni, spettroscopia ultraveloce al femtosecondo.

Collaborazioni (partner e committenti)

Le ricerche nella preparazione dei materiali nanostrutturati, mediante un approccio molecolare, con proprietà fotoniche ed optoelettroniche sono fortemente interdisciplinari pertanto, per il raggiungimento degli obiettivi, sono previste collaborazioni con molte università nazionali soprattutto attraverso (INSTM) ed internazionali, con altri dipartimenti del CNR e con le industrie interessate come per esempio ST Microelectronics e Pirelli Labs. E' attiva una collaborazione con Philips Lighting nell'ambito di un IP finanziato da EU. I principali committenti sono la EU e il MIUR.

Finalità

Obiettivi

Sintesi mirata, mediante ingegneria molecolare e strutturale, di molecole organiche, composti di coordinazione e nanostrutture ibride organiche-inorganiche cristalline con elevate proprietà fotoemittenti, lineari o non lineari, e loro autoorganizzazione per dare materiali ibridi nanostrutturati con elevata stabilità termica e fotochimica, buona processabilità ed elevate proprietà ottiche. Competenze di modellizzazione e calcolo teorico, sintesi organica inorganica e organometallica. Miglioramento delle prestazioni dei seguenti dispositivi: a) Sensori luminescenti; b) Caratterizzazione nuovi OLED ad alta efficienza; c) Dispositivi elettrocromici basati su semiconduttori nanocristallini funzionalizzati; d) Architetture molecolari per la raccolta di energia luminosa (antenne), il trasporto e la conversione in potenziale chimico (separazione di carica).

Risultati attesi nell'anno

Queste ricerche dovrebbero portare, oltre che allo sviluppo di conoscenza scientifica di base, alla preparazione di materiali nanostrutturati e di dispositivi nanometrici per applicazioni fotoniche e optoelettroniche. Ottenimento di un notevole numero di lavori scientifici su riviste internazionali qualificate nei settori di riferimento ed ampia attività di formazione per giovani ricercatori. Ampia divulgazione dei risultati sia nella comunità scientifica mediante le comunicazioni in congressi nazionali e internazionali che nella società mediante articoli sui giornali e interviste. Possibile attività brevettuale nei campi delle sonde luminescenti e di dispositivi elettroluminescenti. Realizzazione e caratterizzazione di prototipi di celle tandem per la produzione fotoelettrochimica di idrogeno. Messa a punto di un sistema per la determinazione della resa quantica assoluta di fotoluminescenza di campioni solidi. Sviluppo delle competenze nell'ambito della spettroscopia di fluorescenza anisotropa.

Potenziale impiego

-per processi produttivi

Queste ricerche mirano alla progettazione e sintesi di componenti molecolari capaci di esprimere delle funzioni di interesse per applicazioni tecnologiche avanzate e alla loro nanoorganizzazione per l'ottenimento



di dispositivi macroscopici e nuovi materiali. In particolare riguardano componenti molecolari (composti organici, organometallici e composti di coordinazione) da impiegare per la costruzione di dispositivi per NLO, sensori luminescenti, dispositivi fotonici, dispositivi elettrocromici, dispositivi per l'elettronica molecolare, dispositivi per la conversione dell'energia luminosa in energia elettrica. I prodotti che si vogliono ottenere riguardano sia lo sviluppo di conoscenze, che permettono la comprensione dei fenomeni che sono alla base delle funzioni studiate a livello molecolare, anche mediante la modellizzazione molecolare e il calcolo teorico, che permettono di migliorare la progettazione delle molecole (ingegneria molecolare), che la funzionalità a livello di dispositivo macroscopico o di materiale nanostrutturato. In conclusione l'impiego potenziale dei prodotti attesi per processi produttivi è molto ampio.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

La progettazione e sintesi di componenti molecolari per materiali funzionali nanostrutturati e l'indagine volta alla comprensione dei processi indotti in sistemi molecolari complessi dall'assorbimento di fotoni sono di enorme attualità e hanno larghe potenzialità di ricaduta applicativa sia nello sviluppo di materiali innovativi che in quello della conversione dell'energia solare.

Moduli

Modulo: Componenti molecolari, supramolecolari o macromolecolari con proprietà fotoniche ed optoelettroniche
Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Componenti molecolari, supramolecolari o macromolecolari con proprietà fotoniche ed optoelettroniche
Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
1679	296	556	0	2531	1129	1981	322	N.D.	3982

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
25	30

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	2	0	0	0	0	1	0	3

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
6	6	11	23

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sistemi molecolari e prodotti funzionali

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sezione di Padova
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIAN GIACOMO FACCHIN

Elenco dei partecipanti

Baccarin Claudia	liv. VI	Facchin Gian Giacomo	liv. III	Pace Giuseppe	liv. III
Berton Adriano	IV	Gleria Mario	II	Sassi Alessandro	III
Corro' Daniela	IV	Mollo Teresa	VIII	Venzo Alfonso	II

Temi

Tematiche di ricerca

Nell'ambito della sintesi metallorganica di complessi impiegabili in processi catalitici o adatti come precursori molecolari per prodotti funzionali, le ricerche riguardano: i) complessi di metalli di transizione (neutri e ionici, contenenti leganti isonitrili, carbonili, alchini, diazoalcani e carbenici) in reazioni di formazione di nuovi legami chimici; ii) sistemi molecolari quali derivati fosfazenici funzionalizzati con gruppi in grado di coordinare metalli di transizione.

Stato dell'arte

L'attività di ricerca ha coinvolto la progettazione, la sintesi e la caratterizzazione spettroscopica di composti metallorganici attraverso la coordinazione di substrati organici insaturi e non (nitrili, isonitrili, alchini, olefine, monossido di carbonio, ilidi, etc) e la loro attivazione all'attacco da parte di nucleofili ed elettrofili.

Azioni

Attività da svolgere

Attivazione di leganti isonitrilici per coordinazione a centri metallici (Au, Cr, W, Pt,...). Tale attivazione è estendibile in generale a vari altri leganti organici e consente la sintesi di sistemi, per esempio eterociclici, difficilmente ottenibili mediante sintesi organica tradizionale e impiegabili per lo sviluppo di prodotti funzionali. Funzionalizzazione di polimeri fosfazenici contenenti gruppi ossidrilici con diazoderivati recanti sostituenti alchilici da varia natura.

Punti critici e azioni da svolgere

La sintesi metallorganica di complessi di metalli di transizione attraverso procedure anche innovative e la loro caratterizzazione chimico-fisica richiedono consistenti finanziamenti e impiego di risorse umane. Ciò è indispensabile per raggiungere una massa critica adeguata e per promuovere scambi scientifici con realtà di ricerca nazionali e straniere.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Collaborazioni (partner e committenti)

Le collaborazioni si svolgeranno prevalentemente con il Dipartimento di Processi Chimici della Facoltà di Ingegneria dell'Università di Padova, col Dipartimento di Tecnologie Industriali dell'Università di Trento e con l'Istituto Superiore Tecnico dell'Università di Lisbona (Portogallo).

Finalità

Obiettivi

La rilevanza dell'approccio metallorganico si basa sulla possibilità di modulare la reattività di molecole organiche di varia complessità coordinate ad un centro metallico. A seconda della natura di quest'ultimo e dei leganti ancillari possono essere favoriti cammini di reazione che procedono attraverso intermedi di energia minore consentendo di indirizzare la reazione verso la formazione del prodotto desiderato. Caratterizzazioni mirate porteranno a definire le condizioni di sintesi ottimali.



Risultati attesi nell'anno

Preparazione e messa a punto di processi di sintesi di complessi di metalli di transizione (Co, Cu, Ag, Au, Pd, Pt...) contenenti leganti attivabili (isonitrili, carbonili, leganti insaturi, beta-dichetonati..) in seguito a coordinazione sul centro metallico. Sviluppo di sistemi molecolari quali precursori per prodotti funzionali (derivati fosfazenici e silani contenenti gruppi in grado di coordinare centri metallici).

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo: Sistemi molecolari e prodotti funzionali
Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Padova

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
366	103	0	0	469	1	104	33	N.D.	508

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
5	7

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
1	0	0	0	0	0	0	0	0	1

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	0	0

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Dispositivi per spintronica a base di strutture ibride organico-inorganico e semiconduttori magnetici diluiti

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Sede principale svolgimento:	Bologna
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	VALENTIN DEDIU

Elenco dei partecipanti

Bonato Giuseppina	liv. VIII	Giustiniani Carla	liv. VII	Taliani Carlo	liv. I
Dediu Valentin	III	Natali Marco Stefano	III	Torzo Giacomo	I
Destro Pierina	IV	Rose Salvino	V	Zambolin Claudia	VII

Temi

Tematiche di ricerca

Proprietà statiche e dinamiche degli spin dei portatori di carica all'interfaccia tra materiali ferromagnetici e semiconduttori organici; proprietà elettriche, magnetiche e ottiche di dispositivi ibridi organico-inorganico con elettrodi spin polarizzati; crescita e caratterizzazione di film di ossidi magnetici (manganite, magnetite ed altri) con Pulsed Plasma Deposition (PPD); crescita e caratterizzazione di film di metalli magnetici; proprietà magneto-ottiche dei film magnetici e delle strutture ibride; crescita di diversi film di ossidi, nitruri e carburi con la tecnica PPD; crescita MOVPE di film semimetallici e di semiconduttori magnetici diluiti per la spintronica; caratterizzazioni strutturali (raggi X) e morfologiche (AFM) di film magnetici

Stato dell'arte

L' utilizzo di una logica digitale basata su effetti quantistici (Spintronica) è considerato nei nostri giorni come uno dei approcci più promettenti per il Quantum Computing e memorie digitali. Nella Spintronica l' informazione viene elaborata attraverso la polarizzazione degli spin dei portatori di carica moltiplicando quindi la quantità d' informazione trasportata da "carica" a "carica + spin". Il personale della commessa ha avuto il ruolo importante di proporre per la prima volta alla comunità scientifica l' utilizzo dei materiali semiconduttori organici in Spintronica (brevetto). I semiconduttori organici coniugati, avendo una bassa interazione spin-orbitale e iperfine, sono in grado di trasportare le cariche a diversi centinaia di nanometri (anche a temperatura ambiente) conservando l' orientamento degli spin. I materiali magnetici spin polarizzati come le manganite a magnetoresistenza colossale, la magnetite, diversi ossidi magnetici drogati e i semiconduttori magnetici diluiti sono, dall'altro lato, indispensabili per la realizzazione di iniezione spin polarizzata nei dispositivi ibridi spintronici.

Azioni

Attività da svolgere

Studi delle proprietà statiche e dinamiche all'interfaccia tra i semiconduttori organici e diversi materiali magnetici (ossidi e metalli); studi di valvole a spin con diversi elettrodi ferromagnetici e diversi semiconduttori organici; proprietà spettrali risolte in tempo (1 picosecondo) e efficienza di OLED con uno o due elettrodi spin polarizzati; crescita film magnetici e organici; miglioramento della qualità magnetica e strutturale di film di magnetiti su substrati organici; caratterizzazioni magneto-ottiche (Kerr) di qualità magnetica dei film e di trasporto spin attraverso i semiconduttori organici; magnetoresistenza e effetto Hall (normale, anomalo e planare) su film magnetici.

Punti critici e azioni da svolgere

Necessità dell'acquisizione delle parte mancanti e della messa a punto definitiva nei 2006-2007 del sistema di crescita e caratterizzazione di strutture ibride ferromagnetico-organico (HIGS) comprendente deposizione a flussi molecolari di materiali organici, deposizione ossidi ferromagnetici con Pulsed Plasma Deposition, deposizione metalli normali e ferromagnetici; necessità dell'acquisizione di un'installazione per la spettroscopia tunnel spin resolved in funzionante in UHV e in un largo intervallo di temperatura. messa a punto della crescita MOVPE/ALE di films ferromagnetici InMnAs, GaMnAs, MnAs;



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze principale sono: proprietà statiche e dinamiche all'interfaccia organico-ferromagnetico; proprietà degli ossidi magnetici spin polarizzati; proprietà dei semiconduttori organici; dispositivi spin-optoelettronici ibridi; MOKE, Hall e magnetoresistenza; elettro- e fotoluminescenza risolta in tempo nei campi magnetici; crescita di diversi film sottili con tecniche PPD, MOVPE, ALE; sintesi di precursori non convenzionali per MOVPE; proprietà strutturali Le tecnologie e tecniche di indagine principali sono: (in stato di avanzamento) sistema complesso (HIGS) per la fabbricazione di dispositivi ibridi spintronici comprendente le tecniche PPD, e-beam, OMBD, vaporizzazione termica, con analisi (magneto-ottiche e magneto-elettriche) in situ; 2 sistemi di crescita PPD; crescita di GaMnAs via MOVPE; tecnica ALE (Atomic Layer Epitaxy); campi magnetici bassi, medi ed alti (fino a 7T) con possibilità di inversione; MOKE e magnetoresistenza (4-300K); foto- ed elettroluminescenza in campi magnetici con risoluzione temporale; diffrattometria ad alta risoluzione; microscopia elettronica; spettrometria di massa di ioni secondari (SIMS); RBS

Collaborazioni (partner e committenti)

Collaborazioni scientifiche con: più di 20 Università italiane e commesse CNR, Wurzburg University, Linköping University, Twente University, Nijmegen University, Mons University, Cambridge University, Oxford University, IMEC (Belgium), CNRS (Strasburgo e Paleseau), University of Utah (USA), South Florida University (USA), Los Alamos National Laboratory (USA), Fudan University (Shanghai); Collaborazioni industriali con: Organic Spintronics, Cambridge Display Technology, Thales, Philips La collaborazione tra ICIS-Padova e ISMN-Bologna è stata molto attiva e fruttuosa ed è consistita da parte padovana nella misura XRD di films di LSMO e Fe₃O₄ depositati presso ISMN e da parte bolognese nella misura MOKE e RAMAN di films di MnAs depositati presso ICIS.

Finalità

Obiettivi

- studio dei processi di iniezione e trasferimento di spin nei semiconduttori organici e alle interfacce ferromagnetico-organico;- sviluppo e caratterizzazione di nuovi dispositivi spin-optoelettronici di tipo spin valve, transistori e OLED con elettrodi spin polarizzati;- studio del comportamento degli stati eccitonici tripletto e singoletto generati da un'iniezione di cariche spin polarizzate;- messa a punto della crescita MOVPE e ALE photo-assistita di film ferromagnetici epitassiali semimetallici e semiconduttori magnetici diluiti

Risultati attesi nell'anno

magnetoresistenza nelle spin valve ibride orizzontali e verticali basati su semiconduttori organici nuovi (pentacene e Alq₃); descrizione qualitativa e quantitativa di proprietà magnetiche all'interfaccia organico-ossido magnetico; controllo magnetico delle proprietà spettrali di OLED con elettrodi spin polarizzati; film metallici ferromagnetici su substrati organici; film di ossidi ferromagnetici sui substrati organici con proprietà magnetiche robuste a temperatura ambiente; misure magneto-ottiche time resolved per lo studio del trasporto spin polarizzato nei semiconduttori organici; crescita dei film ceramici con Pulsed Plasma Deposition; film di semimetalli magnetici e semiconduttori magnetici diluiti con proprietà magnetiche robuste

Potenziale impiego

- per processi produttivi

L'utilizzo dei semiconduttori organici nella spintronica permetterà di sviluppare dei dispositivi spin valve, OLED e sensori magnetici di una nuova generazione funzionanti a temperatura ambiente. La combinazione ossidi magnetici-semiconduttori organici si contraddistingue per una tecnologia di preparazione relativamente economica, essendo tutti i materiali molto meno sensibili alle impurità in confronto ai semiconduttori tradizionali (Si, Ge, GaAs e altri). Si profila quindi un importante ruolo dei semiconduttori organici nella spintronica, e, da un altro lato, un'importante modifica attraverso la funzionalità spin polarizzata delle funzioni già acquisite nei dispositivi standard organici. Lo sviluppo delle nuove metodiche di fabbricazione di semiconduttori magnetici diluiti e ossidi magnetici sono indispensabili per applicazioni recenti e future nelle memorie magnetiche, nei dispositivi illuminatori e nella sensoristica magnetica.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

E' importante menzionare che i dispositivi spintronici ibridi utilizzano prevalentemente materiali non inquinanti. Italia è stata all'avanguardia dello sviluppo della spintronica organica. Un andamento positivo in questo campo consoliderebbe il suo prestigio scientifico e dovrebbe portare ad applicazioni futuri in grado di aprire la strada alla creazione di piccole e medie imprese nei settori di memorie magnetiche, nanotecnologia, sensoristica.



Moduli

Modulo: Dispositivi per spintronica a base di strutture ibride organico-inorganico e semiconduttori magnetici diluiti
Istituto esecutore: Istituto di chimica inorganica e delle superfici
Luogo di svolgimento attività: Bologna

Modulo: Dispositivi per spintronica a base di strutture ibride organico-inorganico e semiconduttori magnetici diluiti
Istituto esecutore: Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Luogo di svolgimento attività: Bologna

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
319	227	669	0	1215	127	1023	336	N.D.	1678

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
4	5

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	1	2	4	0	0	0	1	0	8

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
6	3	10	19

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



dispositivi multifunzionali avanzati basati su nanostrutture organiche e ibride e loro investigazione mediante sonde ottiche non convenzionali (DIMO)

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Sede principale svolgimento:	Bologna
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MICHELE MUCCINI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Bonfiglioli Tiziano	V	Muccini Michele	III	Santato Clara	III
Cesaro Franca	IV	Murgia Mauro	III	Santi Spartaco	III
Loi Maria Antonietta	III	Ruani Giampiero	II	Zamboni Roberto	II
Martiniello Antonio	V				

Temi

Tematiche di ricerca

Le tematiche di ricerca su cui siamo impegnati coordinando iniziative europee riguardano l'elettronica e l'optoelettronica molecolare. In particolare i ricercatori della commessa coordinano iniziative comunitarie che vedono il coinvolgimento di partners industriali internazionali per la realizzazione di laser organici pompati elettricamente. Lo studio di superfici e interfacce molecolari e ibride e di biosistemi è svolto utilizzando lo stato dell'arte delle tecniche di preparazione e caratterizzazione ottica nel contesto di progetti nazionali (FIRB) ed europei (VI Programma Quadro).

Stato dell'arte

Fotodiodi, fotoricettori, celle solari e illuminatori basati su nanostrutture organiche e ibride sono promettenti alternative a basso costo ai dispositivi tradizionali. Recentemente il CNR-ISMN ha realizzato i primi transistor ambipolari emettitori di luce (LET). I LET, oltre ad essere il primo esempio di dispositivi organici realmente multifunzionali, rappresentano anche una promettente strategia per realizzare display a matrice attiva e laser organici pompati elettricamente.

Azioni

Attività da svolgere

L'attività da svolgere sarà focalizzata sullo studio delle proprietà dei materiali nanostrutturati organici e ibridi finalizzato al controllo delle caratteristiche elettroniche, fotoniche ed optoelettroniche dei dispositivi. Parallelamente si realizzeranno prototipi di dispositivi di celle solari, illuminatori e transistor ad effetto di campo emettitori di luce basati su film e interfacce nanostrutturate organiche e ibride. L'ingegnerizzazione delle componenti attive dei dispositivi avverrà con tecniche di deposizione in ultra alto vuoto. Verrà implementato un innovativo sistema per l'imaging ottico ad onda evanescente che consentirà lo studio con elevata risoluzione assiale (30-50 nm) di biosistemi e architetture nanostrutturate multistrato.

Punti critici e azioni da svolgere

Le principali azioni da svolgere per raggiungere gli obiettivi riguardano il completamento di un avanzato sistema per la fabbricazione e caratterizzazione dei dispositivi in ambiente controllato (condizioni combinate di HV e atmosfera con < 1ppm di ossigeno e acqua) e l'implementazione di un sistema di imaging ottico ad onda evanescente. Gli elementi di criticità risiedono principalmente nell'ottimizzazione delle prestazioni dei materiali attivi. Questi aspetti verranno affrontati anche beneficiando di collaborazioni internazionali.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le principali competenze presenti nella commessa riguardano le proprietà chimico-fisiche dei semiconduttori organici, la realizzazione di sistemi nanostrutturati organici e ibridi con proprietà elettroniche e fotoniche, la preparazione di biosistemi ed il loro studio anche in-vivo con tecniche ottiche, la microscopia e la spettroscopia ottica, la realizzazione di dispositivi elettronici e fotonici. Le competenze sono implementate attraverso tecnologie di processo di materiali in vuoto e di nanostrutturazione tridimensionale, e tecnologie di fabbricazione di dispositivi elettronici ed optoelettronici. Le principali tecniche di indagine



utilizzate per lo studio di superfici, interfacce e biosistemi sono tecniche ottiche e spettroscopiche avanzate. Le sonde ottiche nanoscopiche, sia di fluorescenza che Raman confocale, rappresentano lo stato dell'arte internazionale. I dispositivi sono studiati con tecniche di misura optoelettroniche basate su sistemi integrati in grado di monitorare simultaneamente, in ambiente di lavoro controllato, la risposta elettrica, l'efficienza assoluta di emissione, lo spettro di emissione ottica.

Collaborazioni (partner e committenti)

Collaborazioni scientifiche: IBM, Zurich (CH); IMEC, Leuven (B); AMO GmbH, Aachen (D); Philips-Eindhoven (NL); 3 Dag-Zurich (CH); Exitech-Oxford (UK); Centro Ricerche Plastoptica, Amaro (UD); CSEM- Zurich (CH); Università Northwestern (USA); Università di Hong Kong; CNR-ISOF, CNR-IMEM, CNR-ITOI; INSTM - Milano, Firenze, Catania, Padova; Università di Milano; Università di Bologna; Università di Parma; Sincrotrone di Trieste; CNR Dipartimento Materiali e Dispositivi
Committenti: ELECTROLUX S.p.A., Sued Chemie S.p.A.

Finalità

Obiettivi

1. Realizzazione e studio di superfici e interfacce organiche e ibride con proprietà elettroniche, fotoniche ed optoelettroniche 2. Studio di biosistemi tramite imaging ottico finalizzato alla biodiagnostica di processi neurologici degenerativi. 3. Progettazione e realizzazione di dimostratori di dispositivi multifunzionali avanzati (e.g.LET), fotodiodi e fotoricettori basati su sistemi organici e ibridi; 4. Correlazione tra le proprietà chimico-fisiche delle superfici e delle interfacce alla nanoscala (determinate con sonde ottiche nanoscopiche) e le caratteristiche dei dispositivi.

Risultati attesi nell'anno

Nell'anno in corso i risultati attesi riguardano la realizzazione di dispositivi multifunzionali a base organica con prestazioni che superino lo stato dell'arte. In particolare, si intendono realizzare transistor emettitori di luce con caratteristiche di trasporto di carica ambipolare bilanciata e con valori di mobilità di 10-2 cm²/VS. Ci si attende inoltre di superare lo stato dell'arte per quel che riguarda l'efficienza di estrazione della luce da dispositivi OLED.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

ICT e componentistica elettronica, Display di nuova generazione, componentistica e sorgenti innovative per illuminazione, superfici fotovoltaiche per l'edilizia, dispositivi per la biodiagnostica.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

I risultati attesi dall'attività della commessa rispondono alla necessità di sviluppare una società dell'informazione sempre più inclusiva ed alla portata di tutti, utilizzando al contempo materiali eco-compatibili che consentano una strategia su larga scala di risparmio energetico sia dal punto di vista della produzione che dell'utilizzo dell'energia. L'attività nel campo dei biosistemi risponde alla necessità di sviluppare tecniche di diagnosi precoci e non invasive di malattie neurodegenerative.

Moduli

Modulo: dispositivi multifunzionali avanzati basati su nanostrutture organiche e ibride e loro investigazione mediante sonde ottiche non convenzionali (DIMO)

Istituto esecutore: Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Bologna

Modulo: Imaging ottico in modelli bio e nanotecnologici

Istituto esecutore: Istituto per i trapianti d'organo e immunocitologia

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Bologna

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
445	225	548	0	1218	248	1021	332	N.D.	1798

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
7	10

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	2	1	3	0	0	0	0	0	6

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
5	2	6	13

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Nanoingegneria chimica di nuovi materiali per lo sviluppo tecnologico e la qualità della vita mediante metodi computazionali ab-initio, diffrazione di raggi X ad alta risoluzione e descrittori quantistici della funzionalità

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MARIO BARZAGHI

Elenco dei partecipanti

liv.

liv.

liv.

Tem

Tematiche di ricerca

- Analisi modellistica ab-initio di memorie non volatili a cambiamento di fase, basate su leghe calcogenure quali $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$.- Studio di legami chimici non convenzionali mediante la funzione sorgente, un descrittore della densità elettronica fondato sulla Teoria Quantistica degli Atomi nelle Molecole.- Sviluppo di modelli e algoritmi per decomporre descrittori elettronici globali di un sistema cristallino (es., il coefficiente di Seebeck, che misura il potere termoelettrico di un materiale) in contributi per banda e per atomo o gruppo di atomi.- Studio delle reazioni di trasferimento protonico in acqua e della regioselezione di cicloadizioni 1,3-dipolari mediante l'analisi dei descrittori quanto-meccanici di modelli realistici.- Analisi strutturale, sperimentale e computazionale, di nuovi materiali funzionali supramolecolari basati sul legame ad alogeno.- Studio quantitativo delle interazioni energetiche intra- ed inter-molecolari, responsabili della conformazione, dell'impaccamento e della reattività di sistemi cristallini complessi, mediante descrittori topologici della densità elettronica e del suo laplaciano e descrittori globali.

Stato dell'arte

La nanoingegneria chimica ab-initio costituisce un metodo innovativo ed emergente nell'ambito degli studi computazionali basati su principi primi e relativi alla struttura di sistemi complessi e dei materiali. Esso ha trovato le sue prime applicazioni nel corso del V PQ della Comunità Europea, cui l'ISTM ha partecipato con il contratto G5RD-CT2000-00292 relativo al progetto "Nanoengineering of High Performance Thermoelectrics", ed ora ci si aspetta che possa dare precise indicazioni alla progettazione di memorie non volatili a semiconduttore basate sul cambiamento di fase (phase change memory, PCM), candidate a sostituire la memoria flash nei calcolatori del futuro. D'altro canto, gli studi della densità elettronica, sperimentale e teorica, sono fondamentali nella previsione delle proprietà di ogni sistema chimico e costituiscono un settore di ricerca di grande attualità ed in continuo sviluppo. I progressi tecnologici nel campo della diffrazione di raggi X consentono accurate misure della densità elettronica in tempi sempre più brevi e nell'ISTM vi è uno dei pochi laboratori al mondo in grado di effettuare misure su cristallo singolo a temperature inferiori a 20 K.

Azioni

Attività da svolgere

Studio energetico di possibili modelli strutturali locali per la fase amorfa di $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$; analisi topologica del legame chimico nelle strutture studiate e correlazione con la struttura a bande; calcolo delle proprietà di trasporto elettronico delle fasi cristallina ed amorfa e variazioni in funzione della composizione della lega calcogenura. Calcoli quantomeccanici post-SCF (MCSCF, CASSCF, Spin-Coupled VB, MP2) della struttura elettronica della nitrilimina ed i cluster protonati di acqua $(\text{H}_2\text{O})_n\text{H}^+$ con $n=4,5,6$ e dell'energetica di mutua interconversione tra questi ultimi. Determinazione mediante diffrazione di raggi X a diverse temperature della struttura e della densità elettronica di sistemi supramolecolari caratterizzati da legami ad alogeno e di molecole di interesse farmacologico. Sviluppo e distribuzione di software per l'analisi di densità elettroniche sperimentali e teoriche. Costruzione di banche dati di descrittori quantistici della densità elettronica, da utilizzare nella previsione di proprietà molecolari e di sistemi complessi e nello studio di interazioni intermolecolari (interazioni farmaco-recettore, riconoscimento molecolare, crystal engineering



Punti critici e azioni da svolgere

Punti critici sono la scarsità di personale di ricerca, sia in formazione che a tempo determinato e indeterminato, e la necessità di aumentare le risorse di calcolo scientifico avanzato a disposizione per mantenere elevato il livello qualitativo e quantitativo della ricerca prodotta. Pertanto, le azioni da svolgere vertono sul reperimento di fondi, interni ed esterni, per l'assunzione di personale in formazione e personale a tempo determinato e per l'acquisto di macchine per calcolo scientifico, in particolare cluster di PC a 64 bit.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze del personale ISTM e universitario associato sono eccellenti ed internazionalmente riconosciute, come è testimoniato dalla partecipazione a progetti europei e nazionali, dalle numerose pubblicazioni, e dalla presenza nella lista dei 21 esperti europei consultati per la stesura del 'Draft RoadMap on Thermolectricity', October 2005. Il know-how esistente è competitivo ed adeguato alla sfida internazionale. Vi sono esperienze pluriennali e grandi competenze nel campo della diffrazione di raggi X su cristallo singolo a temperature inferiori a 20 K. Vengono utilizzati sia diffrattometri convenzionali sia sorgenti non-convenzionali quali la luce di sincrotrone presso Elettra (Trieste) ed ESRF (Grenoble). Nell'ambito della chimica computazionale e della modellistica teorica, le competenze riguardano lo sviluppo di algoritmi e programmi per il calcolo ad alte prestazioni in scienze molecolari. In particolare, i codici TOPOND e TOPXD per l'analisi topologica della densità elettronica in fase condensata hanno avuto una grande diffusione in molti laboratori internazionali.

Collaborazioni (partner e committenti)

- Dipartimento di Chimica Organica e Industriale, Università di Milano.- Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università di Milano.- School of Chemistry, Cardiff University, UK.- Dipartimento di Elettronica e Informazione, Politecnico di Milano.- Dipartimento di Chimica, Università di Aarhus (Danimarca)- Dipartimento di chimica inorganica, fisica e dei materiali, Università di Torino- Dipartimento di chimica, materiali e ingegneria chimica 'G. Natta', Politecnico di Milano.

Finalità

Obiettivi

Obiettivo generale è simulare le proprietà e predire il comportamento di sistemi molecolari complessi e nuovi materiali di rilevante interesse chimico e di importanza strategica in settori quali:- nanoingegneria chimica ab-initio di memorie non volatili a semiconduttore basate sul cambiamento di fase (modelli strutturali delle fasi cristalline stabili e metastabili e modelli strutturali locali della fase amorfa, analisi del legame chimico e delle proprietà di trasporto elettronico);- chimica bio- e supra-molecolare, riconoscimento molecolare, progettazione di farmaci, modellazione di proteine, "crystal engineering", optoelettronica;- analisi di processi chimici fondamentali in ambienti complessi;- nuovi descrittori quantistici di legami chimici non convenzionali (funzione sorgente). A tal scopo si sfrutta la sinergia tra tecniche sperimentali ad alta risoluzione, quali misure di diffrazione di raggi X a temperature inferiori a 20 K, e i metodi propri della chimica computazionale (ivi inclusi lo sviluppo di software specifico e la creazione di banche dati di descrittori quantistici della densità elettronica teorica e sperimentale).

Risultati attesi nell'anno

a) Calcolo della struttura a bande della fase stabile e metastabile cristallina di $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (nanoingegneria chimica ab-initio di memorie non volatili a semiconduttore basate sul cambiamento di fase). b) Scrittura del software di analisi della popolazione elettronica mediante la funzione sorgente (un descrittore quantistico della densità elettronica definito nell'ambito della teoria quantistica degli atomi nelle molecole) con applicazione allo studio del legame metallo-metallo. c) Identificazione delle forme risonanti predominanti nella struttura elettronica della nitrilimina e conseguente razionalizzazione del comportamento reattivo nella cicloaddizione 1,3-dipolari. d) Caratterizzazione dei meccanismi a bassa energia dello scambio protonico in cluster di acqua e proposta di un meccanismo globale che renda conto degli esperimenti di isotopic scrambling per collisione di D_2O con cluster d'acqua protonati. e) Studio sperimentale e teorico della densità elettronica del metabolita fungale austdiolo e dell'antagonista recettoriale dell'angiotensina II LR-B/081. f) Determinazione della struttura molecolare ed elettronica di nuovi sistemi supramolecolari con legami ad alogeno.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

I risultati della ricerca sono propedeutici alla definizione e messa a punto dei processi produttivi in settori di importanza strategica quali la progettazione di memorie non volatili a semiconduttore su scala nanometrica basate sul cambiamento di fase e la progettazione di materiali termoelettrici. Inoltre forniscono un "rational design" ed ottimizzazione delle reazioni di cicloaddizione 1,3-dipolare impiegate nella produzione di farmaci ed altre molecole biologicamente attive. Consentono la progettazione ("crystal engineering") di sintoni supramolecolari ben definiti, basati sul legame ad alogeno, per la produzione di nuovi materiali funzionali



(es. conduttori e superconduttori organici supramolecolari, materiali di rivestimento perfluorurati, materiali per la NLO).

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Lo sviluppo di sofisticati programmi di calcolo e la loro distribuzione, soddisfa alle specifiche esigenze di numerosi laboratori di ricerca.

Moduli

Modulo: Nanoingegneria chimica di nuovi materiali per lo sviluppo tecnologico e la qualità della vita mediante metodi computazionali ab-initio, diffrazione di raggi X ad alta risoluzione e descrittori quantistici della funzionalità

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
0	36	23	0	59	0	59	0	N.D.	59

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
7	10

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	0	0

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sistemi funzionali a nanoparticelle magnetiche

Dati generali

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ALESSANDRO PONTI

Elenco dei partecipanti

liv.

liv.

liv.

Temi

Tematiche di ricerca

È convinzione pressoché unanime che le nanotecnologie appartengano alla famiglia delle tecnologie abilitanti, capaci di determinare un'adeguata discontinuità nello sviluppo tecnologico tale da dare luogo a prodotti concorrenti grandemente migliorati o del tutto nuovi o anche di far nascere settori produttivi prima inesistenti. Le nanoparticelle magnetiche (NPM), costituite da calcogenuri di metalli di transizione sono un campo scientificamente ancora giovane, in cui non è ancora terminata la fase di progettazione e sintesi di nuovi materiali e di esplorazione delle possibilità applicative. Le caratteristiche peculiari delle NPM che vengono sfruttate per la progettazione e la creazione di nuovi sistemi funzionali sono essenzialmente tre: la possibilità di modulare le proprietà magnetiche regolando il diametro delle NPM e la natura dello strato stabilizzante; la possibilità di legare alle NPM altre funzionalità chimiche; la possibilità di immagazzinare informazione sotto forma di orientamento magnetico delle NPM con un'elevatissima densità.

Stato dell'arte

Molti esempi applicativi di NPM come prodotti funzionali sono basati sulla funzionalizzazione delle NPM, in quanto il normale strato stabilizzante è idrofobo e chimicamente inerte dato che il legante espone una lunga catena alifatica. La funzionalizzazione delle NPM avviene in genere mediante approcci poco efficienti e costosi quali lo scambio del legante. Un metodo efficiente di funzionalizzazione permetterà di contenere i costi e di ampliare lo spettro dei prodotti funzionali. L'alto tasso di crescita della densità di immagazzinamento dati su supporti magnetici non sarà più sostenibile nel futuro a causa del limite superparamagnetico di stabilità dei dati. È opinione largamente diffusa che la migliore soluzione al problema sia la creazione di sistemi di NPM di ossidi metallici con diametro minore di 10 nm, in quanto le NPM magnetiche offrono i seguenti vantaggi: magnetizzazione e campo coercivo alti e modulabili; assenza di corrosione; sintesi bottom-up. La sintesi di appropriate NPM è perciò un campo di ricerca attualmente assai attivo.

Azioni

Attività da svolgere

- Creazione di metodologie di sintesi di NPM di calcogenuri metallici ferromagnetici- Individuazione delle reazioni per la sintesi dello strato funzionalizzante e per la funzionalizzazione finale- Realizzazione di surfattanti che permettano la sintesi delle NPM e che siano buoni substrati per la reazione di funzionalizzazione- Realizzazione di molecole funzionalizzanti- Sintesi di NPM funzionalizzate- Funzionalizzazione di NPM con gruppi cationici, neutri e anionici, anche ai fini dell'auto-organizzazione delle NPM- Creazione di metodologie di sintesi di NPM di calcogenuri metallici antiferromagnetici.- Creazione di metodologie di sintesi di NPM a nocciolo ferromagnetico e guscio antiferromagnetico di calcogenuri metallici- Creazione di metodologie di sintesi di NPM a nocciolo antiferromagnetico e guscio ferromagnetico di calcogenuri metallici- Creazione di metodologie di sintesi di NPM pluristrato, con strati di calcogenuri metallici alternamente ferro- e antiferromagnetici- Cristallizzazione in super-reticoli delle NPM strutturate di cui sopra

Punti critici e azioni da svolgere

L'efficacia e la produttività del progetto potranno essere certamente migliorate se saranno messe a disposizione risorse umane e strumentali maggiori. Per queste ultime è da notare come la grande strumentazione impiegata in questo progetto è di proprietà dell'Istituto proponente e in piccola parte (NMR, EPR). Le altre grandi strumentazioni (TEM, XRD, XPS, AFM) sono di proprietà di altri Enti, il che genera problemi di costo e di efficienza dato che l'utilizzo da parte nostra non è né esclusivo né prioritario.



per gli altri Enti. Pertanto, l'acquisto di detta strumentazione è sicuramente funzionale all'ottimizzazione della produttività scientifica. Non meno importante è la possibilità di reclutare personale già formato, almeno parzialmente, con contratti a tempo determinato e personale da formare con borse di studio o assegni di ricerca.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Competenze: Chimica e fisica delle nanoparticelle, specialmente magnetiche
Chimica organica
Microscopia
Spettroscopia
Strutturistica
Tecniche di indagine: Laboratorio di sintesi di NPM in atmosfera controllata
Laboratorio di sintesi di leganti per NPM
Spettroscopie NMR, EPR, IR, XPS
Diffrazione a raggi X
Microscopia e diffrazione elettronica
Microscopia AFM
Magnetometria SQUID
Hardware e software per calcolo scientifico

Collaborazioni (partner e committenti)

È stato ottenuto un cofinanziamento per questo progetto dalla Fondazione CARIPLO. Sono partner? DCOI UniMI ??? PoliMi ???

Finalità

Obiettivi

Creazione di sistemi a NPM funzionalizzate mediante una tecnologia di pro-funzionalizzazione, dotando cioè la superficie esterna della NPM di gruppi chimici facilmente sostituibili con un'ampia gamma di funzionalità. La tecnologia che si intende sviluppare è indipendente dal tipo di funzionalità che si vuole introdurre, così da essere applicabile in maniera generale senza cambiamenti. Le funzionalità introdotte saranno di varia complessità e generalità: da funzioni idrofile stabili in ambiente chimicamente attivi, funzioni utili per l'attività e l'auto-organizzazione delle NPM. Creazione di sistemi a NPM di calcogenuri metallici con struttura core-shell privi di matrice. L'accoppiamento a livello nanometrico di materiali ferro- e antiferromagnetici introduce un'interazione (exchange bias) potenzialmente in grado di stabilizzare magneticamente le NPM. L'assenza di matrice permette di utilizzare un approccio bottom-up adatto alla produzione su larga scala e di meglio controllare le proprietà del sistema. L'utilizzo di calcogenuri metallici rende la sintesi più semplice, elimina i problemi di corrosione e ossidazione e migliora la tribologia.

Risultati attesi nell'anno

- Tecnologia di sintesi di NPM di calcogenuri metallici ferromagnetici efficiente ed economica
- Tecnologia di sintesi di NPM di calcogenuri metallici antiferromagnetici: individuazione dei precursori e del metodo di sintesi, ottimizzazione delle condizioni di reazione
- Tecnologia di funzionalizzazione di NPM: individuazione dei surfattanti, delle molecole profunzionalizzanti e funzionalizzanti e delle reazioni per la loro mutua addizione.
- Realizzazione di NPM funzionalizzate con gruppi cationici, neutri e anionici

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Dispositivi e supporti magnetici per immagazzinamento dati con elevata densità areale, non ottenibile con materiali convenzionali

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo: Sistemi funzionali a nanoparticelle magnetiche
Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
0	8	65	0	73	0	73	0	N.D.	73

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
7	10

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	0	0

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce



Progettazione di Nuovi Precursori Molecolari per Nanosistemi e Ottimizzazione del Processo MOCVD per la Fabbricazione e/o Modifica delle Funzionalità delle Superfici

Dati generali

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica inorganica e delle superfici
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GILBERTO LUCIO ROSSETTO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Ajo' David	I	Crociani Laura	III	Rizzo Luigi	IV
Battiston Giovanni	II	De Zuane Franco	VII	Rossetto Gilberto Lucio	II
Benetollo Franco	III	Destro Pierina	IV	Sbrignadello Gino	II
Bonato Giuseppina	VIII	Gerbasi Rosalba	III	Spolaore Martina	III
Carta Giovanni	III	Giustiniani Carla	VII	Zambolin Claudia	VII
Corrado Valerio	IV	Natali Marco Stefano	III	Zanotto Livio	III

Temi

Tematiche di ricerca

Progettazione e sintesi di composti di coordinazione e organometallici come precursori per i processi MOCVD e ALD. Misure chimico-fisiche per la loro caratterizzazione. Deposizione di film e sintesi di ossidi e relativa caratterizzazione composizionale, strutturale e funzionale

Stato dell'arte

C'è una grande attività scientifica attorno alla tematica della commessa. L'interesse è incentrato sulla preparazione di precursori che consentano la deposizione a basse temperature e il controllo delle proprietà dei film ottenuti, oltre che sull'effetto dei substrati e sulla capacità di realizzazione di materiali nanostrutturati e/o nanostrutture con proprietà nuove o più performanti.

Azioni

Attività da svolgere

L'indagine riguarderà la preparazione di films sottili di superconduttori (niobio e sue leghe con stagno e magnesio boruro), di elettroliti solidi (zirconia e afnia stabilizzate con ossidi di metalli alcalini-terrosi), rivestimenti protettivi polifunzionali a base di ossidi. Le azioni previste riguarderanno sia la ricerca di nuovi precursori molecolari adatti al processo di deposizione e l'ottimizzazione del processo di deposizione per ottenere le caratteristiche desiderate del materiale. Si studieranno pertanto l'influenza dei vari parametri dei processi MOCVD e ALD, compreso l'utilizzo di nuovi precursori, sulla purezza, composizione, morfologia nano- e micro-struttura dei depositi ottenuti. Saranno anche ottenuti film sottili di ossido di titanio via MOCVD in reattore prototipo industriale, con caratteristiche del tutto particolari per quanto riguarda la cristallinità e la stechiometria: i film andranno utilizzati in processi di fotodegradazione di sostanze inquinanti e verificata l'efficacia del processo in presenza di sola luce visibile. Saranno infine preparati e caratterizzati ossidi in bulk adatti alla realizzazione di substrati.

Punti critici e azioni da svolgere

L'estensione dei processi MOCVD e ALD a nuovi materiali risulta ostacolato dalla limitata disponibilità di precursori con buone proprietà di trasporto e con reattività tale da permettere un cammino di decomposizione pulito senza formazione di prodotti collaterali che possono inquinare il materiale depositato. Si affronterà pertanto il problema cercando di sintetizzare nuovi precursori con appropriato tailoring dei leganti in modo da ottenere la volatilità necessaria e di agire sulle caratteristiche costruttive dei reattori MOCVD che permettano l'introduzione in camera di reazione anche di precursori poco volatili o di loro soluzioni mediante l'utilizzo di sistemi di controllo e regolazione di liquidi e di operare in condizioni più rigorose in camera di reazione. Nel caso dell'ottenimento di elettrodi per SOFCs c'è l'esigenza di avere strati porosi che permettano una buona permeabilità all'ossigeno, per cui si cercherà di controllare la micro- e nano-struttura dei depositi, studiando un'adatta combinazione dei reagenti che possa portare ad una elevata velocità di crescita superficiale o provando nuovi sistemi di introduzione in camera con formazione



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi e manipolazione di composti metallorganici ed inorganici e loro caratterizzazione mediante tecniche spettroscopiche e diffrattometriche. Gestione di processi MOCVD a ALD e caratterizzazione strutturale e funzionale di materiali in film e bulk.

Collaborazioni (partner e committenti)

Università di Padova (Prof. Tondello e Casarin) Università di Venezia (Prof. Paolucci) IMIP - CNR (Dott. Bruno) INFN - Legnaro (Prof. Palmierie, Prof. Rigato) Altre Università anche straniere, Istituti CNR e CNRS. Varie aziende (meccaniche, vetro, gemme, impianti dentari).

Finalità

Obiettivi

Gli obiettivi riguardano: la messa a punto di precursori volatili, facilmente manipolabili, a basso costo, la produzione di rivestimenti e film funzionali efficienti nella protezione delle superfici con proprietà chimico-fisiche, meccaniche (tribologia, tarnishing e packaging) e di bio-compatibilità ottimali e film di TiO₂ biocompatibile ed efficiente come fotocatalizzatore e la sintesi di ossidi in bulk da usare come substrati.

Risultati attesi nell'anno

Questi riguarderanno la definizione delle metodologie di sintesi e di purificazione di precursori volatili di magnesio, calcio, afnio e boro facilmente manipolabili e a basso costo. L'ottimizzazione del processo MOCVD per la deposizione di rivestimenti funzionali con le proprietà chimico-fisiche desiderate per un loro impiego come elettroliti per celle a combustibile ad alta temperatura, come protettivi anticorrosione, antiusura e come barriere contro il rilascio di inquinanti. Inoltre saranno messi a punto metodi di sintesi di ossidi in bulk da usare come substrati.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

MOCVD, rivestimenti protettivi, nanocompositi, fotocatalizzatori, funzionalizzazione delle superfici

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

La ricerca tende a dare risposta a problematiche tecnologiche riscontrate nella produzione di rivestimenti protettivi nanostrutturati e nella funzionalizzazione elettrica ed ottica delle superfici ottenibili appunto con l'ottimizzazione dei relativi processi MOCVD e ALD.

Moduli

Modulo: Progettazione di Nuovi Precursori Molecolari per Nanosistemi e Ottimizzazione del Processo MOCVD per la Fabbricazione e/o Modifica delle Funzionalità delle Superfici
Istituto esecutore: Istituto di chimica inorganica e delle superfici
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Sviluppo della spettroscopia di risonanza magnetica nucleare per l'osservazione diretta di eteronuclei per l'indagine su composti inorganici
Istituto esecutore: Istituto di chimica inorganica e delle superfici
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
586	453	0	0	1039	207	660	111	N.D.	1357

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
9	12

*equivalente tempo pieno



<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	1	2	0	0	0	0	3	6

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	4	2	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione e sintesi di nuovi monomeri per la realizzazione di film e superfici funzionali

Dati generali

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto di metodologie chimiche
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIOVANNA MANCINI

Elenco dei partecipanti

Bassanelli Roberto	liv. IV	Gigli Giuliana	liv. V	Pastore Marco	liv. VIII
Bassetti Mauro	II	Mancini Giovanna	II	Stella Aurelia	IV
Cacciapaglia Roberta	III				

Temi

Tematiche di ricerca

Sintesi e completa caratterizzazione chimico-fisica di recettori con proprietà fotoattive che possano essere ancorati o semplicemente depositati su supporti solidi per diagnostica clinica e ambientale. Sintesi di nuovi anfili cationici da usare nella preparazione di liposomi come sistemi di trasporto di farmaci/DNA in protocolli di terapia fotodinamica e terapia genica. Caratterizzazione chimico-fisica e biologica dei liposomi e dei loro complessi con il farmaco (o DNA) per un'ottimizzazione dei parametri responsabili di un'efficace trasporto e/o trasfezione.

Stato dell'arte

Lo studio delle interazioni non covalenti responsabili della organizzazione di superfici con funzioni specifiche ha implicazioni in molti campi, per esempio nella messa a punto di recettori o nella formulazione di sistemi di trasporto di farmaci e/o DNA. Pertanto è al centro dell'interesse di numerosi gruppi di ricerca dei paesi tecnologicamente avanzati.

Azioni

Attività da svolgere

Sintesi di molecole anfili per la formulazione di liposomi cationici come sistemi di trasporto di farmaci e/o DNA esogeno. Caratterizzazione chimico-fisica e biologica dei liposomi e dei complessi liposoma/farmaco(DNA). Correlazione tra caratteristiche chimico-fisiche e biologiche. Sintesi di sistemi molecolari, supramolecolari e polimerici con proprietà fotoniche e optoelettroniche; realizzazione di superfici funzionali in seguito a loro deposizione su supporto solido.

Punti critici e azioni da svolgere

Il punto critico delle attività sopra descritte è rappresentato dalla fase di sintesi organica del progetto. Le forze coinvolte hanno la competenza necessaria, ma sono al minimo necessario per consentire la fattibilità del progetto. La seconda fase del progetto, che consiste nella caratterizzazione chimico-fisica dei sistemi ottenuti, presenta meno problemi dal punto di vista delle forze coinvolte, ma si avvale in molti casi di strumentazione obsoleta che richiede continui interventi tecnici di manutenzione. Dal punto di vista concettuale, la caratterizzazione chimico-fisica porterà comunque ad una razionalizzazione delle caratteristiche strutturali necessarie per ottenere la funzione desiderata e quindi alla individuazione dei sistemi più efficienti, sia nella parte del progetto che riguarda il 'drug delivery' sia in quella che riguarda le superfici con proprietà optoelettroniche. La fattibilità del progetto dipenderà fortemente dalle fonti di finanziamento. Si ritiene inoltre critica la soddisfazione della richiesta personale a tempo indeterminato nonché la conferma del personale che opera attualmente con contratti di ricerca.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi organica e organo-metallica. Chimica supramolecolare. Chimica organico-fisica. Chimica degli aggregati polimolecolari. NMR. Spettroscopia di assorbimento. Spettroscopia di fluorescenza. Microscopia ottica. Microscopia elettronica. Microscopia a Forza Atomica. Valutazione biologica su linee cellulari.



Collaborazioni (partner e committenti)

Collaborazioni nell'ambito di progetti nazionali (FIRB e COFIN) e internazionali. Principali collaborazioni: Dr. F. Ricchelli, CNR ITB -Sezione di Padova; Dr. Maria Grazia Sacco, CNR ITB; Prof. G. Savelli, Università di Perugia; Dr. A. Gamini, Università di Trieste; Dr. A. Molinari, Dipartimento di Tecnologia e Salute, Istituto Superiore di Sanità; Prof. Paavo Kinnunen, Università di Helsinki; Prof. L. Prodi, Università di Bologna; Prof. A. Credi, Università di Bologna; Dr. K. Bartik, Università di Bruxelles; Prof. K. Rissanen, Università di Jyväskylä (Finland).

Finalità

Obiettivi

Utilizzazione delle competenze di sintesi organica e chimica organica fisica per una razionalizzazione delle caratteristiche chimiche e chimico-fisiche che determinano: a) una complessazione ed una veicolazione specifica ed efficiente del farmaco e/o DNA complessato attraverso le barriere biologiche, b) le proprietà ottiche e fotoelettroniche adatte all' progettazione e fabbricazione di superfici strutturate e funzionali.

Risultati attesi nell'anno

Disponibilità di due nuove molecole anfifile da valutare in formulazioni liposomiali e disponibilità di 4-5 monomeri con proprietà fotoniche e fotoelettroniche da depositare su supporto solido. Caratterizzazione chimico-fisica dei monomeri e dei loro aggregati. Caratterizzazione chimico-fisica e valutazione biologica di liposomi formulati con gli anfifili già a disposizione. Deposizione su supporto solido dei recettori a disposizione ed eventuale caratterizzazione delle superfici ottenute.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Catalizzatori ancorati per processi organici.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Sistemi di veicolazione di DNA e farmaci per Terapia Genica e altri protocolli terapeutici. Sensori per il riconoscimento di bio-molecole da utilizzare nella diagnostica clinica e ambientale. Sensori di molecole organiche e inorganiche per monitoraggio ambientale

Moduli

Modulo: Progettazione e sintesi di nuovi monomeri per la realizzazione di film e superfici funzionali

Istituto esecutore: Istituto di metodologie chimiche

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
243	126	30	0	399	2	158	55	N.D.	456

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
3	5

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	2	0	4	0	0	0	0	10	16



<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	1	3	5

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Metodologie chimiche innovative per lo sviluppo e la caratterizzazione di processi all'interfase superficiale

Dati generali

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di metodologie chimiche
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ORNELLA URSINI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Angelini Giancarlo	I	Di Felice Filippo	V	Noviello Ennio Italo	II
Aturki Zeineb	III	Ebano Franco	VII	Piccioni Valeria	III
Berti Antonio	VIII	Fanali Salvatore	I	Polcaro Chiara	II
Brancaleoni Enzo	IV	Fiorani Fiorella	IV	Ragni Pietro	III
Bucci Roberto	IV	Frattoni Massimiliano	V	Rosati Aldo	V
Cannarella Carmelo	III	Gallese Fortunata	III	Rossi Enrico	IV
Capitani Donatella	III	Laguzzi Giuseppe	II	Sbergamo Ezio	VII
Carnevaletti Fabrizio	V	Lilla Edo	V	Serio Vito	II
Ciccioli Paolo	I	Lilla Gaetano	IV	Sinibaldi Massimo	I
Corradini Danilo	II	Moscardelli Roberto	VI	Tarquini Stefania	VII
Cristalli Michele	IV	Nicoletti Isabella	III	Ursini Ornella	III
De Mico Pierluigi	V				

Temi

Tematiche di ricerca

Studio HR-MAS di liposomi multilamellari per il riconoscimento chirale. Determinazione del grado di reticolazione in polisaccaridi. Studio strutturale NMR in soluzione di: polisaccaridi di origine naturale e loro prodotti di epimerizzazione, di poliolefine e di molecole di interesse biologico e farmaceutico. Studio delle interazioni pi-greco. Nuove fasi cromatografiche a base di antibiotici glicopeptidici, proteine, ciclodestrine modificate sia a base di silice sia monolitiche. Sviluppo di metodologie di preconcentrazione on-line in Elettroforesi Capillare (CE) e CE/spettrometria di massa (MS). Materiali metallici trattati con inibitori di corrosione. Studio del processo tramite radioattivazione superficiale. Test di invecchiamento artificiale. Sintesi e caratterizzazione di complessi con il boro per il trattamento protettivo della cellulosa. Valutazione della attività enzimatica ossidativa in funzione dell'immobilizzazione chimica e del tipo di supporto

Stato dell'arte

In base all'esperienza maturata nelle tematiche di ricerca, la attività ben si colloca nell'ambito delle azioni internazionali negli specifici campi: 1) Si è dimostrato di poter formare aggregati molecolari stabilizzati da interazioni pi-greco e liposomi multilamellari. 2) Sono state sintetizzate fasi chirali stazionarie modificando la silice con antibiotici glicopeptidici. Tramite preconcentratori on-line in CE e tramite CE/MS a trappola ionica con interfaccia electrospray sono state sviluppate metodologie ad elevata sensibilità e caratterizzazione permettendone l'applicazione all'analisi in tracce (ppt) di farmaci antiipertensivi d'interesse farmacologico, clinico e forense. 3) Mediante ciclotrone si sono prodotti radioisotopi per la valutazione, (tramite tecnica Thin Layer Activation), dei processi di corrosione di materiali metallici. 4) Sono state avviate le prime sintesi di acilossiborani, su anelli di glucosio e cellobiosio, prima di sperimentarne la formazione sulla cellulosa. 5) Enzimi ossidativi immobilizzati su superfici porose: differenza di stabilità e di catalisi enzimatica tra immobilizzazione fisica e chimica. Indagine su diversi link.

Azioni

Attività da svolgere

Funzionalizzazione con selettori chirali, achirali, composti con attività biologica di materiali monolitici del tipo "sol-gel". Funzionalizzazione della cellulosa con acilossiborani come protettivi di materiale cartaceo di sicuro grado di stabilità: sintesi. Attivazione superficiale di silice mediante polimerizzazione indotta da radiazioni gamma: separazioni chirali. Attivazione di materiali metallici mediante ciclotrone. Fasi stazionarie chirali di silice modificata con polimeri (derivati della tartardiammide) in nanoLC. Sintesi di fase stazionaria chirale di silice modificata con derivati della b-ciclodestrina. Sintesi di liposomi unilamellari misti e studio delle interazioni con proteine globulari in soluzione. Influenza di liposomi, surfactanti cationici e



oligoammine alifatiche sulla formazione del doppio strato elettrico in ECEfficienza di ossidazione enzimatica con tirosinasi, per composti non fenolici. Immobilizzazione chimica su zeoliti. Indagine NMR-DOSY di aggregati molecolari stabilizzati da interazioni pi-greco. Grado di reticolazione, ramificazione in polisaccaridi mediante indagini strutturali NMR. Caratterizzazione strutturale NMR di poliolefine.

Punti critici e azioni da svolgere

La sintesi di acilossiborani della cellulosa deve essere messa a punto attraverso una serie preliminare di sintesi su oligomeri della cellulosa. Il successo di queste azioni garantisce la possibilità di procedere verso il prodotto finale. Per la realizzazione di materiali monolitici di tipo "sol-gel" potrebbero sorgere difficoltà nell'ottenere supporti con struttura e porosità omogenee. Pertanto verranno sviluppati nuovi procedimenti di preparazione.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Competenze multidisciplinari, specializzate nello studio e lo sviluppo di metodologie di indagine, di prodotto, di processo e di procedure industriali, quali: cromatografiche ed elettroforetiche, gas-cromatografiche, spettrometriche di massa, risonanza magnetica nucleare, radiochimiche e di chimica delle radiazioni, meccanismi di reazione e metodologie di processo, tecniche e metodologie di superficie. In particolare: chimica organica preparativa-metallorganica-chimica fisica organica-meccanismi di reazione-riconoscimento molecolare enantioselettivo-sintesi chirale e catalisi enantioselettiva-aggregati molecolari e micellari-catalisi in cavità mesoporese-reazioni enzimatiche e biomimetiche anche su materiali mesoporese-sintesi radiochimiche di farmaci e molecole biologicamente attive-strumentazione campale ed avanzata per il campionamento.

Collaborazioni (partner e committenti)

-UniRoma1 Prof. Crescenzi: polisaccaridi. -UniRoma1 Prof. La Mesa: Misure chimico-fisiche di aggregati pi greco - pi greco. -UniNapoli Prof. Busico, Università di Akron, Prof. Rinaldi: poliolefine. -UniRoma3 Prof. Luisi: Misure Light Scattering aggregati pi greco-pi greco. -UniNapoli Prof. Vincenzo Fogliano: peptidi. -Uni. British Columbia Prof. Burnell: Studio di mesofasi di surfattanti. -Cyclolab, Budapest, Hungary; -Prof. B. Chankvetadze, Tbilisi Univ.: Sintesi di nuove fasi stazionarie. -Prof. M.A. Raggi, Uni Bologna: Ottimizzazione di separazioni chirali. -Prof. G. Bettoni, Uni Chieti: Sintesi di nuovi farmaci antilipidici e separazione per elettroforesi capillare. -Centro Sviluppo Materiali, Dr. V. Ferrari: Determinazione del degrado dei materiali. -Joint Research Centre, Dr. U. Holtzwarth: Attivazioni superficiali mediante ciclotrone. -CNR-Ist. Chimica del Riconoscimento Molecolare. -Prof. A. Messina, 'La Sapienza' Roma: sintesi di colonne monolitiche; -Prof. E. Tesarova, Charles University, Czech Republic: preparazione colonne monolitiche per micro-HPLC; -Dr. M. Flieger, Institute of Microbiology, Czech Republic: sintesi selettori chirali;

Finalità

Obiettivi

Caratterizzazione di aggregati pi-greco per simulare le interazioni membrana-acidi nucleici e membrana amino-acidi aromatici. Studio di meccanismi di polimerizzazione in poliolefine. Caratterizzazione strutturale di polisaccaridi naturali e di polisaccaridi derivatizzati e/o reticolati. Preparazione di capillari da utilizzare sia con tecniche cromatografiche sia elettroforetiche per studi di riconoscimento molecolare entioselettivo. Sviluppo di nuovi inibitori di corrosione a basso impatto ambientale. Messa a punto di un trattamento, mediante formazione di acilossiborani, adatto ad impedire la degradazione della cellulosa. Immobilizzazione su superfici porose di enzimi ossidativi. Indagine della catalisi e della stabilità enzimatica in funzione del supporto inorganico poroso e del processo di immobilizzazione fisica o chimica.

Risultati attesi nell'anno

Colonne con supporti monolitici del tipo 'sol-gel' in CEC e micro-HPLC per la proteomica e metabolomica di indicatori sensibili nella filiera agroalimentare e per separazioni chirali. Sintesi di acilossiborani della cellulosa e verifica della loro stabilità. Silice funzionalizzata con materiale polimerico (derivati della tartardiammide) utilizzata per la separazione chirale di erbicidi e antinfiammatori. La fase a base di ciclodestrina per CEC e nano-LC. Attivazione superficiale di silice mediante polimerizzazione indotta da radiazioni gamma. Liposomi per: (a) modificare la superficie interna di capillari di silice, per neutralizzare interazioni del capillare con proteine e analiti basici; (b) separare proteine e peptidi mediante CEC con pseudo-fasi stazionarie in sospensione nella soluzione. Reattività di ossidazione enzimatica condotta con tirosinasi per composti target non- fenolici. Indagine di interazioni pi-greco- pi-greco mediante NMR-DOSY, di nitropropionati di etile e di cloroacetammidi funzionalizzati con anelli aromatici diversamente sostituiti. Studi NMR di derivati solubili e insolubili dell'acido ialuronico Caratterizzazione strutturale NMR di poliolefine



Potenziale impiego

- per processi produttivi

-Processi di polimerizzazione industriale- Sviluppo della conoscenza della relazione microstruttura-proprietà di poliolefine e delucidazione del meccanismo di catalisi. -Ambito biomedico- Sintesi e caratterizzazione di nuovi polisaccaridi graffiati, reticolati e di liposomi multilamellari. L'accoppiamento CE/MS apre in campo biochimico e biomedico ampie possibilità di analisi e caratterizzazione di proteine, peptidi, markers diagnostici e farmaci in campioni biologici disponibili in scarsa quantità. -Produzione industriale di farmaci- Caratterizzazione di sostanze utilizzate in campo farmaceutico riguardo al grado di purezza e di derivatizzazione al fine di controllare il processo di sintesi.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

-Intermedi protettivi di sintesi- Il trattamento della cellulosa con formazione di acilossiborani può essere un valido sistema, alternativo a quello più complesso oggi in uso, per bloccare il degrado di questo materiale. Il possibile impiego è pertanto quello relativo alla preservazione della carta, con particolare riferimento ad antichi testi di importanza storica e/o artistica. -Enzimi ossidativi immobilizzati su superfici porose. L'immobilizzazione chimica di molecole enzimatiche permette il miglioramento della stabilità dell'enzima, riducendone la velocità di disattivazione, e un utile cambiamento della specificità enzimatica. I processi di immobilizzazione di molecole enzimatiche costituiscono la via per la costruzione e lo sviluppo dei biosensori, intesi come sensori chimici in cui il sistema di riconoscimento utilizza meccanismi biochimici.

Moduli

Modulo: Metodologie chimiche innovative per lo sviluppo e la caratterizzazione di processi all'interfase superficiale

Istituto esecutore: Istituto di metodologie chimiche

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
870	588	265	0	1723	60	913	158	N.D.	1941

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
8	16

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
1	3	0	7	0	0	0	0	1	12

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	1	8	10

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sintesi e crescita di film e superfici nanostrutturate

Dati generali

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIUSEPPINA PADELETTI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Bencini Ilaria	II	Figuretti Mario	IX	Plescica Paolo	II
Bondi Maria Luisa	III	Chirardelli Maurizio	VIII	Pompili Maria Luisa	III
Bragaglia Giovanni	V	Ingo Gabriel Maria	II	Pugliese Maria Teresa	VI
Cardone Fabio	IV	Jones Derek	II	Quagliano Lucia Giacinta	III
Casaletto Maria Pia	III	Kaciulis Saulius	II	Ranieri Giancarlo	IV
Cerri Luciana	IV	Lampiasi Nadia	III	Ricci Antonio	V
Cervello Melchiorre	III	Leo Gabriella	III	Riccucci Cristina	V
Chiorrini Daniela	VIII	Leoni Marcello	III	Roda Silvana	IV
Chiozzini Gianni	IV	Margonelli Andrea	III	Romeo Salvatore	VI
Ciriminna Rosaria	III	Mazzaglia Antonino	III	Ruggieri Giovanni	VI
Convertino Annalisa	III	Moresi Maria Ester	V	Sardoni Arnaldo	IV
Curulli Antonella	III	Orlandi Giuseppina	IV	Simonetti Renzo	V
De Luca Carlo	III	Padeletti Giuseppina	II	Verginelli Francesco	VI
Di Giallorenzo Carla	IV	Pagliaro Mario	III	Viticoli Sesto	I
Federici Fulvio	VI	Palma Amedeo	II	Zane Daniela	III
Ferro Daniela	II				

Temi

Tematiche di ricerca

Vengono studiati e realizzati: -film nanostrutturati con caratteristiche superficiali adatte per applicazioni tecnologiche (fotonica, elettronica, hard-coating, sensoristica) - determinazione di struttura elettronica di nuovi precursori molecolari per applicazioni elettroniche ed ottiche -biofunzionalizzazione di superfici e nanoparticelle -individuazione degli agenti responsabili del degrado di manufatti antichi (metallici e ceramici),derivante da processi di superficie, e proposizione di soluzioni conservative -micro-particelle per applicazioni industriali attraverso processi mecano-chimici

Stato dell'arte

Lo sviluppo di sistemi complessi a ricaduta tecnologica dipende dalla capacità di costruire e controllare film, superfici ed interfacce su scala nanometrica. A livello internazionale l'orientamento è quello di creare nuove funzionalità e performances partendo dalla funzionalità molecolare controllando la materia e le sue proprietà, con la prospettiva di fabbricare sistemi innovativi dotati di proprietà modulabili e adattabili, ad alta capacità di riconoscimento molecolare

Azioni

Attività da svolgere

Gli obiettivi che la Commessa si è posta sono tutt'ora di interesse, sia perché legati a tematiche up-to-date (vedi la parte di manipolazione di superfici con ricaduta nel settore salute, che quella più squisitamente tecnologica) che perché legati al completamento di grossi progetti, siano essi ministeriali (MIUR) o Europei. Va enfatizzato inoltre che le attività già in corso e le competenze presenti nella commessa (sia da un punto di vista progettuale che strumentale) hanno creato nuove possibilità di partecipazione a bandi sia nazionali che europei che nati nel solco delle attività attualmente in corso, potrebbero, se approvati, portare ad intraprendere anche nuove strade molto interessanti. A questo proposito da sottolineare la positiva e sinergica interazione che si sta avendo tra commesse diverse all'interno dell'Istituto. Sicuramente questo è frutto di questo tipo di organizzazione, oltre che della capacità dei singoli a confrontarsi. In conclusione, in considerazione della attualità dei temi affrontati a livello nazionale e internazionale e dalla validità dei risultati ottenuti, si ritiene che gli obiettivi individuati all'inizio dell'anno siano validi e vitali



Punti critici e azioni da svolgere

gli aspetti di ricerca individuati e svolti sono di interesse ed attuali. Lo testimoniano i progetti in corso, nazionali ed europei, le collaborazioni stabilite, nazionali ed internazionali e la pubblicistica per numero e qualità, come pure i brevetti. Si respira però un'aria di precarietà, poiché gran parte dei fondi sono di natura esterna e di conseguenza lo è anche gran parte del personale che lavora sulle attività. Tutto questo se da un lato può generare competitività dall'altro crea anche un notevole disagio legato alla mancanza di reali prospettive a medio termine, che si riflettono sulle attività della commessa. In termini positivi va evidenziata una crescente implementazione dei rapporti tra le persone e tra le differenti commesse dell'ISMN. E' un fattore importante su cui insistere, poiché le idee innovative nascono da un continuo e sinergico confronto tra persone. Sul piano più strettamente tecnico, le tematiche presenti sono valide, attuali e stimolanti. Quelle legate a progetti ormai in scadenza, hanno prodotto germi interessanti per altre tematiche anche interconnesse e sinergiche ad altre esistenti (vedi ossidi e settore bio; nanoparticelle e antiche tecniche)

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Nella commessa sono presenti competenze che riguardano la sintesi di materiali innovativi, con caratteristiche nanometriche, sia attraverso metodologie da evaporazione che per via chimica e meccanochimica. Accanto a questo la commessa può vantare competenze consolidate nello studio di fenomeni legati alla qualità di interfacce tra materiali diversi, alle proprietà di materiali e sistemi correlate alla loro qualità chimica, strutturale, morfologica come al loro grado di nanostrutturazione. Competenze sono presenti anche riguardo alla determinazione della struttura elettronica di nuovi precursori molecolari funzionali ad applicazioni in elettronica ed ottica. Le tecnologie e tecniche di cui la commessa dispone sono: tecnologie per la preparazione di film e superfici e polveri nanostrutturate quali: MBE, MOCVD, PECVD, apparato meccanochimico; tecnologie di sintesi chimica in soluzione e non, per la preparazione di nanoparticelle metalliche e superfici nanostrutturate a base di nanotubi d'oro e carbonio e nanoparticelle lipidiche; tecnologie per diagnostica e manipolazione su base micro e nanometrica quali AFM, STM-UHV, FEG-EDS, SEM-EDS, XPS/AES, SIMS, UPS, ETS, DEAS.

Collaborazioni (partner e committenti)

Max-Planck Inst; Univ. Paris-V; CNRS; CSIC; Centre des Recherches des Musees de France; Museo del Louvre; Museo del Cairo; CSM; Rete Ferroviaria Italiana (RFI); Ministero dell'Interno; Cons. Catania Ricerche; ST Microelectronics; Pfizer Italia; Biotech. Center Cranfield Univ. U.K; Univ. Limerick; Istituto Tumori Fondazione Pascale-Na; NMSU, New Mexico State Univ.-USA; Dip. Chim. Inorg. Chim-Fis. Univ. Messina; varie Università italiane; varie Pubbliche Amministrazioni; IBIM-CNR; Hebrew Univ. of Jerusalem; New York Univ. at Buffalo; New York Univ. at Ithaca-Cornell; Univ. tecnica de Lisboa; ecole National Supérieure de Chimie-Univ. Montpellier; Northwestern Univ. Aachen RWTH; Univ. de Valencia; Fox Petroli; SiliCycle; Thomas Swan; Assotec

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale, basato sulle competenze presenti nella Commessa, è quello di funzionalizzare superfici di interesse tecnologico attraverso lo sviluppo di studi su nuovi precursori molecolari, di metodologie di deposizione, manipolazione e trattamenti superficiali che facciano riferimento ad un approccio di tipo molecolare, con particolare riferimento alle nanostrutture come elemento fondamentale per lo sviluppo di sistemi innovativi.

Risultati attesi nell'anno

nell'ambito di 'film nanostrutturati per applicazioni tecnologiche' si continueranno le seguenti attività: realizzazione di strutture per nanodispositivi operanti a 1,3 micron; realizzazione di film per rivestimenti antiusura a base di nitruri e carbonitruri; nell'ambito di 'Materiali nanostrutturati e strutture per biosensoristica': la preparazione di superfici funzionalizzate sia a base di nanotubi (di oro e grafite) che ossidiche per biosensori (enzimi o DNA based); la realizzazione di nanoparticelle a base lipidica per drug-delivery; la sintesi di nanoparticelle metalliche per funzionalizzare superfici per applicazioni bio; nell'ambito di 'Studio e modifica delle superfici ed interfacce di interesse storico-artistico': continueranno gli studi per l'identificazione delle materie prime utilizzate in particolari decorazioni artistiche per scopi attributivi; sulla base dei precedenti studi sul degrado di manufatti metallici verranno proposti e testati inibitori; nell'ambito di 'Processi mecano-chimici' si continuerà l'applicazione di tali processi per l'ottenimento di polveri submicrometriche da destinare ad usi differenziati.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

la parte con ricaduta nel settore dei processi produttivi è quella legata allo sviluppo di diversi materiali nanostrutturati e dei relativi nanodispositivi per applicazioni optoelettroniche (laser, LED, modulatori e ricevitori), microelettroniche (basati su film dielettrici nanostrutturati di ossidi sistemi MIM e MIS) e



tribologiche (rivestimenti antiusura a base di carburi e carbonitridi). Va anche sottolineato il sostegno che l'attività della Commessa offre all'economia del territorio legata al recupero di antiche tradizioni produttive artigianali, quali i settori ceramico, orafa e metallurgico.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

la parte che meglio si adatta a rispondere a bisogni individuali riguarda lo sviluppo di nuovi materiali nanostrutturati per sensori nel settore biomedico, così come lo sviluppo di nanoparticelle polimeriche e lipidiche solide per il trasporto modificato di farmaci (rilevante risultato è stato l'intrappolamento di un farmaco attualmente commercializzato per la Sclerosi Laterale Amiotrofica). Va anche sottolineato l'uso della meccanochimica che permette anche la rimozione di inquinanti sia organici che inorganici, dai materiali trattati e la ricaduta in termini di bisogni collettivi è misurabile tenendo conto dei progetti coinvolgenti RFI.

Moduli

Modulo: Sintesi e crescita di film e superfici nanostrutturate
Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Modulo: Sintesi e crescita di film e superfici nanostrutturate
Istituto esecutore: Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Modulo: Sviluppo ed applicazione di nanotecnologie per nuove applicazioni terapeutiche in oncologia
Istituto esecutore: Istituto di biomedicina e immunologia molecolare "Alberto Monroy"
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Modulo: Funzionalizzazione di materiali nanostrutturati con tecniche non convenzionali. Sviluppo di nanobiosensoristica avanzata
Istituto esecutore: Istituto di cristallografia
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
1808	548	932	70	3358	292	1772	263	N.D.	3913

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
23	41

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
5	2	0	6	0	0	0	0	6	19

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	3	7	10

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Aspetti chimico fisici dei processi fondamentali

Dati generali

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	STELLUCCIA NUNZIANTE CESARO

Elenco dei partecipanti

Alagia Michele	liv. III	Cignini Pier Luigi	liv. II	Veroli Claudio	liv. V
Brunetti Bruno	III	Ferro Daniela	II		
Cappuccio Giorgio	II	Keheyani Yeghis	III		
		Nunziante Cesaro Stelluccia	II		

Temi

Tematiche di ricerca

- Studio di proprietà chimico-fisiche (termodinamiche, cinetiche, spettroscopiche e reattività) di nuove specie molecolari e materiali candidati ad applicazioni nanotecnologiche, nei processi di vaporizzazione e/o l'interazione gas-solido;- Studio delle proprietà elettroniche e della fotostabilità UV di specie gassose ad alta reattività chimica (radicali, specie transienti, sistemi ad alto contenuto energetico sia neutri che ionizzati) prodotte in fascio supersonico o effusivo, da plasmi, pirolisi e GC-MS, mediante spettroscopie fotoelettroniche con luce di sincrotrone- Produzione e caratterizzazione di film sottili e rivestimenti anche per applicazioni biomediche determinando la stabilità termica di ceramici, protettivi polimerici contro l'ossidazione atmosferica studiando i canali di frammentazione e ossidazione fino a 1200K.- Studio di interfacce, ad es. MeC/MeO₂ (Me = Ti, Zr, Hf, Nb) con crescite orientate di ossido su substrato di carburo in apparato non convenzionale per ottenere giunzioni ceramico-ceramico potenzialmente rilevanti per applicazioni sensoristiche, fotovoltaiche, catalitiche e barriere termiche-Produzione di H₂ da ciclo S-I

Stato dell'arte

Gli studi menzionati intendono contribuire alla crescente domanda di creazione di nuove funzionalità e performances specifiche in campo tecnologico fornendo la completa conoscenza dei materiali coinvolti e la esauriente caratterizzazione dei meccanismi di reazione a cui partecipano, sia nel processo di trasporto e deposizione da fase vapore che nell'interazione gas-solido, e/o mediante la caratterizzazione strutturale di polveri micro- e nano-cristalline e film-sottili anche nelle fasi intermedie di preparazione.

Azioni

Attività da svolgere

Intermetallici:Determinazione delle attività di componenti in leghe, delle entalpie ed energie libere di formazioni di intermetalli, ottimizzazione dei diagrammi di fase.dei sistemi citati con particolare riferimento a sistemi contenenti Mg. Parallela indagine spettroscopica.Film sottili:Studio sistematico di caratteristiche e prestazioni di film di carburi e fosfato di calcio depositati via PLAD e confronto con analoghi depositi ottenuti in fascio elettronico (EBD) e sputtering magnetico(MS).Caratterizzazione di film polimerici mediante PY-GC-MS.Crescita e caratterizzazione di film di fosfori Y₂O₃ e Gd₂O₃ drogati con Eu, Tb e Tm.Crescita di film intermetallici mediante PVD anche su supporti orientati. Caratterizzazione magnetica ed elettrochimica come elettrodi a bassa sovratensione, come elettrodi per celle NiMH.Produzione Idrogeno mediante ciclo solfo-iodio:Studio efficienza catalizzatori.Miglioramento del sistema del trasferimento di flusso in uscita.

Punti critici e azioni da svolgere

La fattibilità dipende dal mantenimento in efficienza delle grosse apparecchiature in dotazione mediante contratti di manutenzione; necessità di aggiornamento dello spettrometro di massa Patco e rifacimento del sistema di acquisizione; necessità di completamento di camera destinata allo studio di reazioni reattive gas-superficie; nell'indagine di produzione H₂ mediante ciclo S-I,necessità di migliorare il sistema di trasferimento del flusso in uscita dal reattore per arrivare alla soluzione di iodio; necessità di rinnovo assegni o contratti di collaboratori attualmente attivi.



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

- Per gli studi di materiali in fase gassosa o di interazioni gas-solido ci si avvale di tecniche classiche quali Spettrometria di Massa in Effusione di Knudsen (KE-MS) anche con ingresso controllato di gas, Termobilancia in Effusione di Knudsen (TB-KE), Termobilancia-Spettrometria di Massa (TB-MS), celle galvaniche ad elettrolita solido (cristallo singolo di CaF₂) per misure EMF, XRD, Spettroscopia FTIR accoppiata a isolamento in matrice (MI) e pirolisi PY-GC-MS; Per le misure delle proprietà elettroniche di specie ad alta reattività ci si avvale di tecniche di fotoassorbimento (XAS, soft-X-ray) e fotoemissione (XPS, UPS, X-ray). La fotostabilità di sistemi reattivi, cioè i canali primari di dissociazione UV, è studiata mediante Spettroscopia Traslazionale di Fotoframmenti - struttura e morfologia di film utilizzati in coatings (leghe speciali, carburi ceramici) o con caratteristiche di biocompatibilità (apatiti) si utilizzano SEM e XRD ad incidenza radente. Informazioni sulla loro durezza e spessore sono ottenute mediante misure di microindentazione. - I dati sperimentali sono coadiuvati anche da opportune tecniche computazionali

Collaborazioni (partner e committenti)

Università: Roma1; Genova, Perugia, l'Aquila, Potenza, Catania; Osservatorio di Napoli; IMIP, Potenza; UNISANTIS, Ginevra, Svizzera; Inst. for Problems of Mat. Science, Ucraina; Inst. of Mat. Res., Slovacchia; ENEA Casaccia; LNF-INFN Frascati; Elettra, Trieste; Institute for Physical Chemistry of Ceramics, Mosca; Dept. of Material Science, University of Hokkaido, Sapporo, Giappone; Inst. for Roentgen Optics, Mosca; Soc. Lupi; ISTC; COST 529 e 531; Network Europeo FP5; INCO Copernicus.

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo comune ai tre Gruppi di Azione Elementare (ex Workpackages) che costituiscono la Commessa è la conoscenza più completa possibile delle proprietà e della reattività di materiali già noti o di nuova sintesi, per concorrere a creare una solida piattaforma di conoscenza di base e delle relative tecnologie necessarie al loro utilizzo. Dal momento che la sede in cui opera la maggior parte dei ricercatori della commessa e che ad essa sono associati molti universitari un importante obiettivo è anche costituito dalla formazione di giovani per avviarli, con un bagaglio di competenze di elevato livello, ad un futuro lavoro di ricerca presso enti pubblici o industrie.

Risultati attesi nell'anno

L'attività di ricerca e l'ampliamento e lo sviluppo delle competenze della commessa forniranno dati sperimentali e teorici importanti per la realizzazione di nuovi materiali di interesse nella nanotecnologia. La massima diffusione dei risultati ottenuti dovrà cementare le già numerose collaborazioni esistenti e permettere una sempre maggiore partecipazione a progetti europei e nazionali e in prospettiva un più stretto contatto con il sistema imprenditoriale. Contributo a formazione specializzata e di alto livello.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- Si studiano materiali inorganici con particolare interesse verso sistemi di alta temperatura quali carburi, siliciuri che presentano sia un interesse in chimica spaziale che applicativo per le loro caratteristiche di resistenza meccanica, termica e chimica. - si studiano materiali polimerici utilizzati come rivestimenti protettivi e industria automobilistica. - Alle classi citate si aggiungono i composti intermetallici. Tra questi una maggiore attenzione è rivolta alle leghe a base di magnesio che trovano applicazione in vari settori tecnologici, dall'assorbimento di idrogeno, alla fabbricazione di parti esterne di dispositivi elettronici di largo consumo (computer portatili, telefoni cellulari), all'impiego strutturale in sistemi di autotrazione. - Composti binari contenenti Ni e terre rare trovano applicazione come getters per ridurre la presenza di ossigeno in sistemi in ultra alto vuoto. - Gli studi termodinamici e spettroscopici di bromuri e ioduri di terre rare sono rivolti a e ai loro eterocomplessi contenenti sodio, utilizzati nell'industria della illuminazione per aumentare la resa luminosa di lampade alogene e perché non corrosivi per l'involucro

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Lo studio di materiali ceramici (fosfati) di cui si studia sia la stabilità termica che la capacità di ricoprire un impianto metallico di geometria appropriata offrono promettenti prospettive nel campo della implantologia medica sia in campo chirurgico che dentistico grazie alla elevata resistenza e alla capacità di formare forti legami con l'osso umano in vivo. Gli studi miranti alla produzione di idrogeno, sia mediante reazioni di ossido-riduzione dell'ilmenite che mediante il citato processo solfo-iodio vogliono contribuire a soddisfare la sempre crescente domanda di produzioni di fonti alternative di energia. Va anche sottolineato che il ciclo S-I ha grandi potenzialità nello sfruttamento termodinamico dell'energia solare. La sua 'messa a punto', infatti, permetterebbe di produrre idrogeno dall'acqua usando energia solare senza l'utilizzo di idrocarburi né come materie prime né come fonti di energia. La caratterizzazione strutturale di nuovi materiali polimerici utilizzabili in vari campi dell'industria e in campo biomedico.



Moduli

Modulo: Aspetti chimico fisici dei processi fondamentali
Istituto esecutore: Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
397	91	42	0	530	0	133	25	N.D.	555

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
6	7

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
6	0	0	2	0	0	0	0	0	8

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	2	0	2

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Processi di polimerizzazione radicalica: polimerizzazione RAFT, applicazioni delle radiazioni ad alta energia e della spettroscopia ESR

Dati generali

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	ANGELO ALBERTI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Alberti Angelo	I	Dardani Andrea	VII	Mancini Gianni	IV
Benaglia Massimo	V	Emmi Salvatore	II	Martelli Alessandro	II
Bragaglia Giovanni	V	Favaretto Silvano	V	Monti Angelo	V
Carenza Mario	II	Fuochi Piergiorgio	II		
Dall'Olio Alessandra	VI	Lavalle Marco	III		
		Macciantelli Dante	IV		

Temi

Tematiche di ricerca

Sintesi di agenti RAFT di nuova generazione, loro impiego in polimerizzazioni di monomeri mirati all'ottenimento di polimeri con proprietà specifiche e studi ESR di tali processi. Studi via radiolisi pulsata e spettrofotometria cinetica di polimerizzazioni di monomeri acrilici o epossidici e dell'effetto inibitore di ossigeno, alcoli e chinoni. Polimerizzazione radioindotta di monomeri funzionali o loro miscele nonché di IPNs a base di poli(idrossibutirrato con monomeri acrilici bifunzionali

Stato dell'arte

La polimerizzazione radicalica controllata (RAFT) è tematica di avanguardia nel settore dei polimeri ben definiti e la ricerca di nuovi CTA ne è un obiettivo prioritario. L'irraggiamento Electron Beam dei materiali ottenuti può poi migliorarne la stabilità termica, le proprietà isolanti, quelle meccaniche, e la resistenza all'abrasione. A loro volta i nanocluster rivestono notevole importanza come catalizzatori in fase liquida.

Azioni

Attività da svolgere

Viene investigata l'influenza di sostituenti sulla performance dei CTA di più vasto impiego e si svolgono studi ESR durante la polimerizzazione RAFT, si studia la preparazione radioindotta di composti a base di resine epossidiche e la caratterizzazione dei radicali cationi coinvolti nella polimerizzazione. Si studia inoltre la sintesi, mediante polimerizzazione indotta da raggi gamma di opportuni monomeri in fase liquida, di polimeri di tipo gel che abbiano effetto templante per i metalli.

Punti critici e azioni da svolgere

Una parte consistente dell'attività di ricerca comporterà l'uso dell'acceleratore LINAC in dotazione ad ISOF. Tale strumentazione necessita di interventi di manutenzione straordinaria per i quali sono già stati richiesti i finanziamenti adeguati. La completa disponibilità di tale strumentazione rappresenta quindi un punto critico per la fattibilità delle ricerche descritte.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Nell'ambito del WP1 esistono ampie competenze circa la chimica dei radicali liberi organici, la polimerizzazione radicalica RAFT, la spettroscopia ESR ed il suo uso per la caratterizzazione di specie paramagnetiche transienti e per la determinazione di costanti di velocità di processi omolitici. Nell'ambito del WP2 si hanno conoscenze circa l'impiego delle radiazioni ionizzanti (electron beam e radiazioni gamma) e dei metodi spettroscopici per indagare sulla natura e la reattività di specie radicaliche. Nell'ambito del WP3 know-how sulla progettazione e reattivazione di strumentazione elettronica analogica e digitale per diverse finalità (processori, microprocessori, unità elettroniche di potenza ecc.)

Collaborazioni (partner e committenti)

Per lo svolgimento delle ricerche sopra descritte i prevedono collaborazioni sia in ambito nazionale che internazionale. In particolare queste coinvolgeranno: CSIRO, Australia; Politecnico, Milano; ENSICAEN,



Francia; Facoltà di Ingegneria, Università di Palermo; Dipartimento di Chimica, Università di Bologna; Istituto degli Isotopi, Accademia delle Scienze Ungherese; Istituto Superiore di Sanità, Roma.

Finalità

Obiettivi

Individuazione di CTA più performanti, preparazione di films di oligomeri e polimeri atti con proprietà radiocromiche, sintesi radioindotta di polimeri gel e di Interpenetrating Polymer Networks (IPNs). Ci si avvarrà di conoscenze nell'uso delle radiazioni ad alta energia, della capacità di caratterizzare matrici polimeriche mediante lo studio nanomorfologici e dell'uso della spettroscopia ESR per la caratterizzazione di radicali e la determinazione di costanti di velocità delle loro reazioni.

Risultati attesi nell'anno

Il progetto si articola nel triennio 2005-2007. Nel primo anno si ritiene di poter portare a compimento la sintesi di nuovi CTA per il processo RAFT e determinare costanti di velocità per le reazioni in cui partecipano, ottenere polimeri gel atti alla dispersione di centri metallici e IPNs da utilizzare per il rilascio controllato di ormoni e chiarire i meccanismi della radiopolimerizzazione di monomeri acrilici ed epossidici nonché della inibizione da parte di agenti diversi.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

I risultati contribuiranno a rendere la polimerizzazione RAFT competitiva a livello applicativo e industriale. I risultati potranno avere importanti ricadute per l'industria tessile. La chiarificazione dei meccanismi di polimerizzazione epossidica mediante E-Beam consentirà l'impiego di catalizzatori più appropriati per un'economia di processo e il miglioramento delle proprietà delle resine. Utilizzo delle radiazioni ionizzanti in processi industriali (sterilizzazione di contenitori per alimenti, trattamenti di varia natura su polimeri). Il trattamento E-Beam delle acque inquinate integra i processi tradizionali di trattamento riabilitante.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo: Processi di polimerizzazione radicalica: polimerizzazione RAFT, applicazioni delle radiazioni ad alta energia e della spettroscopia ESR
Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
656	199	7	0	862	133	339	160	N.D.	1155

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
6	12

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	2	3	5

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Progettazione molecolare di nanosistemi organizzati

Dati generali

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sezione di Padova
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	LIDIA ARMELAO

Elenco dei partecipanti

Armelaio Lidia	liv. II	Gross Silvia	liv. III	Seraglia Roberta	liv. III
Baccarin Claudia	VI	Mollo Teresa	VIII	Traldi Pietro	I
Barreca Davide	III	Ravazzolo Antonio	VI	Venzo Alfonso	II
Corro' Daniela	IV	Sassi Alessandro	III	Vittadini Andrea	II

Temi

Tematiche di ricerca

Sintesi di polioossometallati di metalli di transizione e di network ibridi inorganico-organici come dielettrici ad alte frequenze, sensori e switches molecolari; sintesi di network inorganici vetrosi a base di ossidi, anche a porosità controllata e ordinata (mesoporosi) e modifica delle loro proprietà mediante crescita in-situ di nanocluster; sintesi di nanotubi e nanorod inorganici con caratteristiche anisotrope; correlazioni struttura-proprietà.

Stato dell'arte

L'interesse crescente che negli ultimi anni ha investito il settore delle nanotecnologie può essere giustificato, in buona parte, dalla possibilità di progettare a-priori le proprietà dei nanosistemi in funzione delle applicazioni a cui sono destinati. Oggi, infatti, avanzate metodologie sintetiche bottom-up consentono, attraverso aggregazione controllata di opportuni costituenti molecolari, la realizzazione di nanosistemi con prevedibili e specifiche funzioni e proprietà.

Azioni

Attività da svolgere

Progettazione e sintesi di molecole-precursore (beta-dichetonati di seconda generazione, xantati, silani funzionalizzati...) e di building blocks nanodimensionali (polioossometallati semplici e misti di elementi di transizione anche recanti gruppi polimerizzabili) da usare in processi CVD e Sol-Gel per la sintesi di nanoparticelle, nanotubi, nanocompositi host/guest, film nanostrutturati inorganici di ossidi semplici e perovskitici per applicazioni in sensoristica, fotonica ed energetica ed ibridi inorganico-organici; studio dei meccanismi di organizzazione ed auto-organizzazione a livello di singola particella mediante microscopie ad effetto tunnel ed ottimizzazione di processi di deposizione di cluster mono- e bi-metallici su/in matrici di ossidi con attenzione alla dispersione delle particelle; ancoraggio ed impianto chimico di composti molecolari o supramolecolari (complessi di ioni lantanoidei con proprietà emissive, polioossometallati con proprietà ottiche ...) su network inorganici (silice, ossidi semiconduttori ...) ed ibridi.

Punti critici e azioni da svolgere

La realizzazione di nanosistemi funzionali mediante approcci sintetici bottom-up, la caratterizzazione chimico-fisica e lo studio delle correlazioni struttura-proprietà conferiscono carattere strategico e multidisciplinare alla ricerca. La fattibilità del progetto richiede quindi consistenti risorse umane e finanziarie. Ciò si rende necessario per sviluppare e mantenere le necessarie sofisticate strumentazioni, per raggiungere una massa critica adeguata e per promuovere la formazione scientifica anche attraverso scambi con realtà di ricerca straniere.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

-Microscopio STM (Omicron)-Microscopio STM (Park - APE Research)-Microscopio AFM (Park)-Microscopio AFM / STM (NT-MDT SPM Solver P47H-PRO) -Spettrometro multitecnica Phi 5600 ci XPS-Auger completo di accessori -Diffratometro Bruker D8 Advance per analisi GIXRD ed XRR con camera in temperatura-Microscopio elettronico FESEM Zeiss-Fluorimetro Jobin-Yvon per analisi risolte in tempo, con monocromatore a triplo reticolo e rivelatore CCD a 1096 canali-Spettrometro FT-IR Nicolet equipaggiato per analisi di film sottili -Spettrometro PM-IRRAS Nicolet (PEM, ZnSe crystal) per superfici-Cary 5E UV-Vis



completo di interfaccia-diffuse refl. -Dip-coater per deposizione di strati sottili via Sol-Gel in atmosfera controllata-Spin-coater per deposizione di strati sottili via Sol-Gel-Dry-box Braun per la manipolazione in atmosfera inerte controllata -Reattore MOCVD completo di accessori-Reattore Plasma-CVD in UHV, generatore RF -Spettrometro di massa EI, CI, FAB ed FD-Spettrometro HPLC/MS con ionizzazione ESI ed APCI-Sistema "laser ablator" per lo studio di specie adsorbite su superfici-Forni in aria ed azoto (T max 1800 C) e a microonde

Collaborazioni (partner e committenti)

L'attività scientifica si basa su solide collaborazioni tra ricercatori afferenti a Istituti CNR e Università italiane (attraverso INSTM) e straniere, che da tempo sono impegnate in attività di ricerca fondamentale e di innovazione tecnologica nel campo delle nanotecnologie. Le sinergie sono maturate e si sono consolidate anche attraverso un collaudato rodaggio nella partecipazione a progetti di rilevante interesse sia nazionale (PF-MSTA, FIRS, FIRB, PNR) che internazionale.

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale consiste nella progettazione e sintesi di nanosistemi multi-functional con approcci bottom-up da fase liquida e chimica da fase vapore, utilizzati singolarmente o combinati in strategie sintetiche di tipo ibrido. L'interesse risiede nello sviluppo di dispositivi optoelettronici innovativi, sensori più selettivi, sistemi per produrre energia senza un corrispondente su scala macroscopica. Competenze di sintesi inorganica, organometallica e di caratterizzazione avanzata.

Risultati attesi nell'anno

L'attività di ricerca avrà come primo risultato una più ampia conoscenza di base che si concretizzerà attraverso pubblicazioni e brevetti. I risultati attesi riguardano:- la definizione dei meccanismi di organizzazione di atomi metallici a dare cluster (Au, Ag, Cu), di cluster di carbonio (fullereni sostituiti), di mono e pluristrati di ossidi metallici (TiO₂, CeO₂) su varie superfici (HOPG, Si, Pt):- la preparazione e messa a punto di nanosistemi organizzati di molecole (composti di coordinazione e metallorganici, mono e polinucleari) con proprietà ottiche o magnetiche in strati sottili o supportate su superfici funzionalizzate di ossidi semplici (SiO₂, ZrO₂, ZnO) o composti (SiO₂-ZrO₂):- la preparazione e caratterizzazione di nanosistemi organizzati costituiti da nanocluster di ossidi metallici (Co, Ce, Pr) su xerogel di ossidi porosi (Zr, La, Zn) e l'ottimizzazione dei protocolli di sintesi; - la messa a punto di strumentazione avanzata per la sintesi e caratterizzazione di molecole-precursore e nanosistemi;- la formazione di giovani ricercatori. Tale attività porterà come ulteriore risultato lo sviluppo di materiali molecolari e nanostrutturati per dimostratori.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

nanotecnologie, sol-gel, PE-CVD, rivestimenti, trattamento di superfici

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Oltre allo sviluppo di conoscenze di base, i risultati della ricerca trovano già impiego in rivestimenti nanostrutturati anticorrosione di metalli ed hanno notevoli prospettive come materiali per fotonica e sensoristica. Essi portano ad un potenziale impiego in energetica (SOFCs) di polveri nanostrutturate a base di ossidi.

Moduli

Modulo: Progettazione molecolare di nanosistemi organizzati
Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Padova

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
451	321	235	0	1007	196	752	103	N.D.	1306

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
6	9

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
3	5	2	1	0	0	0	0	3	14

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	3	1	4

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery



Cristallografia di biomolecole e studi funzionali

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di cristallografia
Sede principale svolgimento:	Sezione di Monterotondo
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	DORIANO LAMBA

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Amorese Alvaro	IV	D'Aprile Fausto	IV	Mura Pasquale	II
Bachechi Fiorella	II	Di Gennaro Raimondo	VIII	Nespola Franca	VIII
Bartolucci Cecilia	III	Fares Vincenzo	II	Pascucci Barbara	III
Bombelli Ersilia	IV	Ferrante Maria Rita	V	Pochetti Giorgio	III
Cassetta Alberto	III	Giordano Cesare Giovanni	III	Quinto Cataldo	VII
Catricala' Massimiliano	VI	Lamba Doriano	III	Ranieri Antonello	VIII
Cellai Luciano	I	Mirandi Sandro	V	Rea Giuseppina	III

Temi

Tematiche di ricerca

Modulo1: Studi struttura-funzione di proteine di interesse biomedico e biotecnologicoa)Studi strutturali di fattori di trascrizione PPAR in complesso con farmaci anti-dislipidemicib)Studi biochimici, cinetici e strutturali di mutanti sito-specifici della macchina molecolare GroELc)Studi strutturali e funzionali di complessi della Topoisomerasi I umana-DNA-farmacid)Studi strutturali e funzionali di neuroanticorpi e di complessi acetilcolinesterasi-inibitorie)Studi strutturali e funzionali di proteine chimeriche con attività tromboliticaf)Studio strutturale e funzionale del dominio START di fattori di trascrizione HD-ZipModulo2: Studi struttura-funzione di acidi nucleicai)Acidi nucleici e loro complessi con proteine che ne influenzino il funzionamento: replicazione virale e trascrizione del DNAb)Acidi nucleici e loro complessi con composti del rutenio e dell'oro con attività anti-tumoralec)Sintesi di acidi nucleici modificati: loro utilizzo negli studi strutturali di complessi proteina-DNA e proteina-RNA mediante tecniche NMR, raggi-X ed ESR e studi funzionali in vitrod)Studio delle sequenze telomeriche bersaglio del danno ossidativo in cheratinociti umani

Stato dell'arte

Nel panorama internazionale e nazionale in particolare, la ricerca farmaceutica soffre di un calo di innovazione con una diminuzione nella produzione per anno di nuovi farmaci. I recenti sviluppi della genomica strutturale e funzionale e della proteomica si stanno traducendo in filoni di indagine, sia della ricerca di base che applicata, inesistenti fino a pochi anni fa. A fronte delle migliaia di sequenze di geni disponibili è forte l'esigenza di estrarre informazioni di rilevanza biologica in forma quantitativa, adatte alla produzione di modelli per applicazioni biomediche e biotecnologiche. Ruolo importante avrà pertanto le capacità high throughput nei settori dell'espressione, della purificazione, ed in particolare della cristallizzazione delle proteine e delle metodologie per la determinazione delle strutture proteiche. Questo processo, nell'ambito della genomica strutturale, è attualmente individuato e denominato "From genes to drugs via crystallography". L'IC vanta una consolidata tradizione nell'ambito di ricerche in campo farmaceutico, mirate attualmente allo studio integrato delle relazioni struttura-funzione-attività come base per la progettazione di nuovi farmaci.

Azioni

Attività da svolgere

La commessa svolgerà ricerche in campo farmaceutico, mirate allo studio delle relazioni struttura-attività-funzione per la progettazione di nuovi farmaci. Esse saranno integrate dallo studio delle basi molecolari di processi biologici quali: il riconoscimento proteina-proteina o proteina-acidi nucleici; proteina-ligandi; i meccanismi catalitici degli enzimi, in condizioni fisiopatologiche; l'espressione genica; il folding proteico. Le attività della commessa si svolgeranno nell'ambito di rilevanti ed emergenti targets terapeutici quali le infezioni virali, la resistenza agli antibiotici, gli antitumorali, le malattie neurodegenerative (morbo di Alzheimer), le malattie cardiovascolari (l'infarto acuto del miocardio) e l'obesità.



Punti critici e azioni da svolgere

I punti critici fanno riferimento alle difficoltà che occorrerà affrontare nell'ambito: a) Metodiche d'ingegneria genetica comunemente utilizzate nell'espressione delle proteine ricombinanti in forma solubile e correttamente foldate, in sistemi di espressione procariotici che eucariotici b) Sintesi e purificazione degli acidi nucleici contenenti oligonucleotidi modificati c) Sintesi chimica di potenziali farmaci antitumorali d) Ottenimento di cristalli di proteine e di loro complessi con ligandi, inibitori, adatti per studi di diffrazione su cristallo singolo e) Risoluzione di strutture tridimensionali di proteine da dati di diffrazione di raggi X da sorgenti convenzionali o da luce di sincrotrone con tecniche di sostituzione molecolare o tecniche MAD/SAD/MIR f) L'accesso dei ricercatori a risorse finanziarie adeguate (dotazione ordinaria e carenza di fondi aggiuntivi) g) Modernizzazione del parco strumenti non rinnovati per mancanza di finanziamenti: sistemi "high throughput" per la purificazione e cristallizzazione di proteine h) Richiesta di unità di personale considerando anche l'impegno che il servizio e le ricerche condotte presso la linea XRD1 ad ELETTRA richiedono.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

La commessa dispone delle seguenti competenze specifiche: bioinformatica, biologia molecolare, metodiche biochimiche e biofisiche, sintesi, purificazione e caratterizzazione di acidi nucleici: DNA/RNA, nucleotidi marcati con isotopi stabili o modificati recanti gruppi chelanti e sonde EPR; isolamento, espressione (sistemi procariotici ed eucariotici), purificazione e caratterizzazione (CD, DLS) di proteine ricombinanti e caratterizzazione di loro complessi con ligandi/inibitori; sintesi organica e metallo-organica di composti con attività antineoplastica; metodologie avanzate per la soluzione del problema della fase ed utilizzo della luce di sincrotrone (diffusione anomala), metodologie computazionali tipiche della biocristallografia, modellistica e dinamica molecolare. I partecipanti alla commessa hanno un accesso privilegiato all'utilizzo della linea di diffrazione XRD-1 presso il Laboratorio Italiano di Luce di Sincrotrone ELETTRA, Trieste, strumento indispensabile per la caratterizzazione dei cristalli di macromolecole, e per l'applicazione delle metodologie avanzate (SAD, MAD, soft X-ray) per la soluzione delle strutture proteiche e/o loro complessi con DNA/RNA.

Collaborazioni (partner e committenti)

Politecnico ed Università di Milano, Roma 1, 2 e 3, Firenze, Napoli, L'Aquila, Camerino, Bari; Istituti CNR ICB, IBMP; Istituto Superiore di Sanità, Roma; Istituto Dermopatico dell'Immacolata, Roma; NIH, USA; McGill University, Montreal (Canada); Max-Planck-Institut fuer Biochemie, Monaco (Germania); Fondazione Calliero, Trieste; Industrie ACRAF-Angelini, Roma; BIOSINT (Sigma-Tau), Roma; Menarini Ricerche SpA, Roma; SudBiotech SpA, Roma; Chiesi Farmaceutici SpA, Parma; Sanochemia Pharmazeutika, Vienna (Austria); Lay Line Genomics SpA, Roma; Scuola Internazionale di Studi Superiori Avanzati, Trieste; International Centre for Genetic Engineering and Biotechnology, Trieste; MRC Laboratory of Molecular Biology, Cambridge (UK).

Finalità

Obiettivi

La commessa si prefigge (ai) comprensione, mediante un approccio multidisciplinare, dei meccanismi che regolano il riconoscimento molecolare, la catalisi enzimatica, l'espressione genica, le interazioni proteina-proteina, proteina-acidi nucleici, il folding proteico in organismi sia procariotici che eucariotici. Essi saranno perseguiti tramite procedimenti innovativi di sintesi organica e metallo-organica, sintesi automatica in fase solida, isolamento, espressione e purificazione di proteine ricombinanti, analisi spettroscopiche, studio delle relazioni struttura-attività-funzione, modellistica molecolare, studi strutturali allo stato solido (diffrazione di raggi X). ii) progettazione e sviluppo di nuovi prodotti di interesse bio-farmacologico e biotecnologico

Risultati attesi nell'anno

Modulo 1 - Studi struttura-funzione di proteine di interesse biomedico e biotecnologico a) Espressione delle proteine PPAR e sintesi di ligandi derivati dell'acido clofibrato b) Espressione di mutanti puntuali della chaperonina GroEL c) Espressione del dominio catalitico della Topoisomerasi I umana in cellule di insetto. d) Studi strutturali e funzionali del neuroanticoagente AD11; struttura 3D del complesso AChE-derivato della geneserina e) Cristallizzazione e determinazione della struttura 3D del trombolitico K2t-uPA f) Sovraespressione del dominio START di A. thaliana in E. coli. Modulo 2 - Studi struttura-funzione di acidi nucleici a) Preparazione del complesso triplo della RNA polimerasi DNA dipendente di E. coli con DNA ed RNA. Prove di stabilità e competenza b) Studi sintetici e strutturali di composti antitumorali: complessi multicloro di rutenio e di Au(I) con fosfine terziarie c) Studio spettroscopico (NMR, raggi X, ESR) e strutturale di alcuni oligonucleotidi modello. d) Caratterizzazione della risposta allo stress ossidativo in cheratinociti umani con capacità riparative normali.



Potenziale impiego

- per processi produttivi

Nel trascorso decennio, nel campo della Biologia, abbiamo assistito alla crescita esplosiva delle conoscenze a livello cellulare e molecolare e alla nascita della genomica e della proteomica. Questi due recenti filoni di ricerca hanno fatto intravedere promettenti prospettive verso lo sviluppo di nuove strategie di prevenzione, diagnostica ed intervento verso le innumerevoli malattie umane con basi genetiche. Oggi l'importanza della proteomica nell'era postgenomica è stata universalmente riconosciuta, come si evince dall'analisi di progetti europei ed internazionali finanziati in questi ultimi anni e, in particolar modo, dal numero sempre crescente di piccole, medie e grandi industrie che hanno investito o stanno investendo nel settore biotecnologico e chimico-farmaceutico con orizzonti molto promettenti verso lo sviluppo di nuove terapie e la progettazione di farmaci innovativi. Le tematiche di ricerca e gli obiettivi della commessa sono focalizzati al fine di comprendere i complessi meccanismi biologici e cellulari, per poter successivamente intervenire a livello molecolare nei processi patologici.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Le competenze chimiche, biochimiche, biocristallografiche e di biologia molecolare della commessa sono utilizzate in modo concertato in settori applicativi della chimica farmaceutica e delle biotecnologie. Particolare enfasi è posta alla progettazione di farmaci innovativi nell'ambito di rilevanti ed emergenti targets terapeutici (medicina e scienze della vita): infezioni virali, resistenza agli antibiotici, antitumorali, malattie neurodegenerative quali il morbo di Alzheimer e malattie cardiovascolari quali l'infarto acuto del miocardio e l'obesità.

Moduli

Modulo: Struttura e funzione di proteine di interesse biomedico e biotecnologico

Istituto esecutore: Istituto di cristallografia

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Modulo: Studi strutturali e funzionali di acidi nucleici

Istituto esecutore: Istituto di cristallografia

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Modulo: Sintesi di fosfoammiditi di nucleosidi modificati

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare

Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
813	219	30	28	1090	9	258	217	N.D.	1316

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
11	17

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	3	2	7	0	0	0	0	0	12



<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	2	2	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Metodologie cristallografiche

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di cristallografia
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	CARMELO GIACOVAZZO

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Altomare Angela	III	Catricala Massimiliano	VI	Guagliardi Antonietta	III
Arrighetti Gianmichele	V	Chiarella Caterina	VI	Ladisa Massimo	III
Barba Luisa	III	Chita Giuseppe	VI	Lassandro Rocco	VI
Bombelli Ersilia	IV	De Caro Liberato	III	Margonelli Andrea	III
Caliandro Rocco	III	Distante Maria Grazia	VII	Moliterni Anna	III
Camalli Mercedes	III	Filograsso Giovanni	VII	Pifferi Augusto	III
Capitelli Francesco	III	Giannini Cinzia	III	Ranieri Antonello	VIII
Carrozzini Benedetta	III	Giardi Maria Teresa	II	Rizzi Rosanna	III
Cascarano Giovanni Luca	II	Gramaccioni Claudio	VI	Spagna Riccardo	I

Tem

Tematiche di ricerca

- Metodi per la soluzione strutturale delle proteine: fondamentale per il progresso della area biologica. - Sviluppo di metodi per la cristallografia di polveri: fondamentale per lo sviluppo di nuovi farmaci e per la comprensione delle proprietà dei materiali di interesse tecnologico.- Implementazione dei corpi teorici in programmi di calcolo automatico. - Proteine e relativi sensori.- Studi di cristallografia e nanoparticelle attraverso la cristallografia da polveri.- Sviluppo di nuova strumentazione per l'utilizzo di Luce di Sincrotrone.- Sviluppo di strumentazione a raggi x portatili per analisi qualitative e quantitative in situ.

Stato dell'arte

- Il panorama internazionale relativo ai metodi cristallografici per le proteine vede: il progetto CCP4 (dominato dalla cristallografia inglese, che ha tradizionalmente raccolto in forma collaborativa i prodotti informatici di decine di gruppi di ricerca) e il progetto PHENIX (attualmente dominato dalla ricerca americana). Il progetto IL MILIONE, che raccoglie il meglio della metodologia italiana, si porrà come progetto alternativo. - Pochissimi e recentissimi esempi sono disponibili, nel contesto nazionale o internazionale, riguardanti metodologie di calcolo dedicate allo studio e caratterizzazione strutturale di nanoparticelle con diffrattometria da polveri.- Attualmente la gran parte delle linee di sincrotrone per esperimenti di diffrazione, non sono dotate di diffrattometri per misure su campioni in diverso stato di aggregazione. Nel campo della strumentazione portatile vi è una carenza in apparati in grado di svolgere misure di diffrazione e di fluorescenza.

Azioni

Attività da svolgere

a) Progettazione di metodi per la soluzione di strutture cristalline da dati di diffrazione da cristallo singolo, con particolare riguardo alle proteine: tecniche ab initio, SAD-MAD (single anomalous scattering-multiple anomalous scattering), SIR-MIR (single isomorphous replacement-multiple isomorphous replacement), MIR (molecular replacement); b) Progettazione di metodi per la soluzione strutturale da dati di diffrazione da polveri (metodi Diretti e metodi Montecarlo); c) Progettazione di metodi per la caratterizzazione di materiali nanocristallini, microcristallini, compositi nanostrutturati; d) Progettazione di nuova strumentazione diffrattometrica, ricerca strumentale presso ELETTRA; e) Studio di strumentazione a fini sensoristici con interesse agroambientale e per la salute.

Punti critici e azioni da svolgere

Non si intravedono punti critici di natura scientifica che possano ritardare o vanificare le attività programmate, se non quelli di natura amministrativa che riducano l'accesso dei ricercatori alle risorse (dotazione ordinaria dell'Istituto e carenza di fondi addizionali). E' pianificata da alcuni anni l'apertura di una nuova attività scientifica dedicata alla diffrazione di polimeri. Questa attività sarà svolta solo se viene acquistato un diffrattometro per polimeri, all'acquisto del quale questo Istituto intende contribuire con



risorse già disponibili, e se saranno assunti nel corso del 2006 i vincitori dei concorsi CNR-MIUR in fase di espletamento.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

- L'IC, coltivata da diversi anni le metodologie cristallografiche e ha contribuito alla soluzione del problema della fase per le piccole molecole. I programmi SIR97, SIR2004, EXPO e EXPO2004 sono a tutt'oggi fra i programmi più usati sul piano internazionale.- Le competenze cristallografiche del personale dell'IC coinvolto nello studio cristallografico delle particelle sono apprezzate in campo nazionale ed internazionali come dimostrato dalle numerose collaborazioni instaurate finora. Si unisce ad esso il know-how sperimentale sulla diffrazione e la disponibilità di diffrattometri, presenti nell'Istituto, per cristallo singolo e per polveri.- L'Istituto di Cristallografia ha accumulato notevole esperienza nel condurre esperimenti e misure su linee di Sincrotrone avendo contribuito alla progettazione, realizzazione e conduzione della linea di XRD1 presso il sincrotrone Elettra. L'Istituto attualmente ha un accesso diretto e privilegiato a questa risorsa. Si sono sviluppate competenze nella realizzazione di strumentazione, convenzionale e non, per misure con raggi X.

Collaborazioni (partner e committenti)

I proponenti di questa commessa hanno collaborazioni con diverse Università straniere (Nancy, Tenerife, Stoccolma) e italiane (Bari, Perugia, Trieste, Napoli, Roma, Salerno, Udine); col Laboratory for Neutron Scattering, PSI - Zurigo-Svizzera e col Laboratório Nacional de Luz Sincrotron LNLS Campinas, SP - Brasile; con l'Istituto NNL (National Nanotechnology Lab) di Lecce, col Sincrotrone di Zurigo, (SLS-Swiss Light Source), con l'Istituto di Fotonica e Nanotecnologie (IFN-CNR-Roma) e con il Centro di Biotecnologie Avanzate di Genova.

Finalità

Obiettivi

- L'obiettivo fondamentale di questa commessa è l'avanzamento delle capacità umane nel modellizzare la struttura della materia e le sue proprietà, e nello scoprire i metodi più efficaci per raggiungere questo obiettivo. La realizzazione di software, che questo modulo si propone, offre alla comunità uno strumento per impossessarsi di questa conoscenza: i risvolti di carattere applicativo nelle aree biologiche, farmaceutiche e dei materiali fanno di questo modulo uno strumento di interesse industriale. Lo sviluppo e l'applicazione di metodologie cristallografiche nel settore dei nanomateriali è un altro obiettivo, così come la realizzazione di un nuovo setup della stazione sperimentale XRD1 di Elettra, che consenta di utilizzare la linea sia nell'ambito della biologia che in quello della scienza dei materiali con l'introduzione di nuovi apparati sperimentali. Ultimo obiettivo è lo studio di strumentazione per raggi X che possano essere proposti all'industria per la loro commercializzazione con una speciale attenzione al software di analisi e trattamento dati.

Risultati attesi nell'anno

- Corpo di teorie innovative per la soluzione di strutture proteiche con metodi ab initio, SIR-MIR, SAD-MAD, MR; Rilascio del programma IL MILIONE alla comunità scientifica internazionale; Nuovi metodi per le polveri e messa a punto della release EXPO2006 (la release EXPO2007 sarà distribuita).- Sviluppo e applicazione di metodologie cristallografiche nel settore nanomateriali; Release di un programma per la gestione di un diffrattometro per polveri in alta risoluzione con ottiche collimanti e focalizzanti.- Studi per realizzare un prototipo di apparecchiatura per sensoristica basata su fluorescenza; studio di strumentazione per raggi X di interesse industriale.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- I metodi cristallografici sviluppati, e soprattutto i programmi di calcolo automatico relativi, potranno essere diffusamente impiegati dalle industrie operanti nei settori farmaceutico, biologico e dei materiali di interesse tecnologico. Ad esempio, l'analisi qualitativa di polveri è strumento indispensabile nelle fasi iniziali della filiera industriale per portare sul mercato prodotti di interesse farmaceutico. - Le nanoscienze hanno un fortissimo impatto sulla elettronica, sulla farmaceutica, etc.- La comprensione dei meccanismi di formazione o di fusione dei sistemi in fase gel, liquida o microcristallina può essere utilizzata dall'Industria: Alimentare e Conservaturiera, Biocombustibili e Fluidificanti, Cosmetica, Produttori di sostanze cristallo-liquide, (ad es. per Display e Video soft).

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

- E' evidente che le teorie e i programmi di calcolo che verranno sviluppati rispondono ad un bisogno diffuso di conoscenza dei bio- processi più importanti e per la comprensione delle proprietà dei materiali. Lo stesso vale per la sensoristica e per l'impiego delle nanoscienze nelle biotecnologie avanzate e/o della medicina sperimentale. Sono questi settori fortemente orientati a ricerche applicate su specifici temi collettivi (salute, ambiente).- Realizzazione di strumentazione prototipica, suscettibile di ingegnerizzazione e commercializzazione, destinata a laboratori, enti e aziende che necessitano di misure non distruttive.



Moduli

Modulo: Metodologie cristallografiche
Istituto esecutore: Istituto di cristallografia
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Modulo: Progettazione di metodi per la caratterizzazione di materiali nanocristallini e microcristallini
Istituto esecutore: Istituto di cristallografia
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Modulo: Strumentazione cristallografica e applicazioni
Istituto esecutore: Istituto di cristallografia
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Monterotondo

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
935	607	92	169	1803	282	981	230	N.D.	2315

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo *</i>	
ricercatori	Totale
15	24

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	2	3	0	0	0	0	0	5

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	7	0	9

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Sviluppo di Microsistemi Analitici

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica del riconoscimento molecolare
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	MARCELLA CHIARI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Bacigalupo Maria Angela	III	Chiari Marcella	II	Ottolina Gianluca	III
Baldoli Clara	II	Meroni Giacomo	IV	Somma Raffaele	VII
Carrea Giacomo	I				

Temi

Tematiche di ricerca

La commessa, che riunisce ricercatori provenienti da due istituti (ICRM e ISTM), è orientata allo sviluppo di strumenti e metodi innovativi eminiaturizzati per lo studio di genoma e proteoma da utilizzarsi in ricerche di base, nella scoperta e sviluppo di nuovi composti farmaceutici e inprodotti diagnostici. I progetti di ricerca in cui sono coinvolti i diversigruppi facenti capo alla commessa svolgono ricerche sulle seguenti tematiche: 1) Sistemi automatizzati per l'analisi dell'espressione genica e proteica che integrino le seguenti funzioni: preparazione del campione, separazione ed identificazione degli analiti di interesse. 2) Sistemi analitici miniaturizzati, eventualmente trasportabili, basati su sistemi microchip, dotati di elevata specificità e sensibilità nella rivelazione del segnale biologico. 3) Progettazione e sintesi di nuovi PNA utili come sonde analitiche per il riconoscimento altamente selettivo di sequenze di DNA e RNA. 4) Sviluppo di nuove molecole citolitiche, efficaci e di basso costo, attive su liposomi inglobanti chelati di lantanidi, da usare come rivelatori fluorescenti in sistemi omogenei e in dosaggi multianalitici.

Stato dell'arte

Recentemente, lo sviluppo di dispositivi microfluidici per lo studio di genoma e proteoma sta suscitando un grande interesse. La miniaturizzazione del sistema analitico comporta grandi vantaggi per lo studio di sistemi nel quale la quantità di informazione disponibile è praticamente illimitata. Infatti, lo sviluppo di sistemi microfluidici accelera enormemente la velocità di raccolta di tale informazione aumentando l'automazione e riducendo la quantità di materiale richiesto per l'analisi ed il suo costo. Tra le tecniche che maggiormente si prestano alla miniaturizzazione, una di rilievo è riservata alle tecniche di ibridazione su fase solida tipicamente utilizzate nei sistemi microarray. Un secondo settore è quello che prevede la realizzazione di sistemi di analisi totale (micrototal analysis system -m-TAS) nei quali diverse le operazioni necessarie per generare l'informazione sono integrate in un processo automatizzato svolte in dispositivi micrometrici di vetro, silicio o plastica. Tali dispositivi consentono l'automazione dell'analisi e la riduzione della quantità di campione e reattivi necessari.

Azioni

Attività da svolgere

L'attività prevede per l'anno 2006 la validazione dello strumento prototipo per elettroforesi in microchip attualmente disponibile presso l'ICRM in applicazioni di tipi diagnostico. Relativamente alla sintesi di polimeri da utilizzare come matrici setaccianti il DNA, l'attività che prevista riguarda la realizzazione di polimeri radicalici in emulsione inversa e lo studio delle loro proprietà reologiche. Si continuerà inoltre l'attività relativa alla funzionalizzazione di superfici con particolare attenzione alla caratterizzazione dei film sottili prodotti sul substrato mediante collaborazioni esterne. Una parte dell'attività sarà inoltre volta allo sviluppo di metodi analitici fluorometrici a risoluzione di tempo, sia eterogenei che omogenei, utilizzando come marcatori fluorescenti diversi chelati di lantanidi. L'attività del modulo ISTM della commessa sarà dedicata alla sintesi di PNA oligomeri per verificarne la applicabilità in problemi di riconoscimento di DNA. La sintesi di tali oligomeri, costituiti da 10-15 unità monomeriche sarà eseguita per via automatizzata.

Punti critici e azioni da svolgere

I punti critici riguardanti l'utilizzo del prototipo per microchipelettroforesi in applicazioni diagnostiche risiedono nella mancata disponibilità di un sistema di rivelazione della fluorescenza a quattro colori. L'azione



da svolgere è il reperimento di risorse specifiche per continuare lo sviluppo del prototipo migliorando il sistema di rilevazione. Un rafforzamento delle competenze di microfluidica per migliorare il sistema di interfaccia micro-macroscale attualmente in uso è in programma. Per quanto riguarda il modulo ISTM, il punto critico della ricerca, dal punto di vista sintetico, è la reazione di aggancio all'oligomero dell'unità trisferrocenica, per alcuni requisiti di stabilità che ne impediscono l'aggancio durante la fase di sintesi automatizzata. Si sono pertanto progettati linker di differente lunghezza e struttura per effettuare la reazione fra le due molecole in soluzione. Un punto critico per tutti i moduli è l'esiguo numero di persone addette alla ricerca che invece richiede un oneroso lavoro sperimentale ed analitico. È importante trovare personale in possesso della qualificazione a cui offrire contratti anche a tempo determinato.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Nella commessa ci sono competenze relative alle seguenti tematiche: la sintesi e caratterizzazione di polimeri, le metodiche elettroforetiche sia in sistemi slab gel sia in sistemi capillari, la sintesi organica di composti di impiego analitico, la sintesi su fase solida di peptidi e acido-peptidici, la sintesi di composti organometallici, nonché una approfondita conoscenza degli aspetti chimici delle metodiche analitiche più innovative con impiego in genomica e proteomica. Le risorse strumentali dedicate sono: una piattaforma microarray comprendente una stazione di spotting, una stazione di ibridazione e LIF-scanners, unità per elettroforesi capillare, sequenziatore di DNA a 96 capillari, strumenti prototipo per microchip elettroforesi, Laboratori chimici per la sintesi organica, strumentazione analitica: NMR, IR, UV, HPLC, GC, un sintetizzatore automatico di PNA.

Collaborazioni (partner e committenti)

I progetti in corso prevedono la collaborazione con: il Dipartimento di Elettronica e di Informazione del Politecnico di Milano; l'Istituto IMM-C.N.R. sezione di Bologna; l'Istituto Sperimentale Italiano Spallanzani di Milano; il Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione, Università di Pisa; il Dipartimento di Chimica e Ingegneria dei Materiali 'Giulio Natta' del Politecnico di Milano; l'Ospedale San Raffaele di Milano. ESPCI-LECA (Parigi), Tyndal National Institute Ex NMRC (Cork Irlanda), Università Claude Bernard Lyon 1 (Lione), Paul-Ehrlich-Institute Langen (Germania). Il modulo ISTM collabora con il Dipartimento di Chimica Organica Industriale - Università di Milano e con il Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica - Università di Milano.

Finalità

Obiettivi

Attraverso l'integrazione di competenze in campo chimico, tecnologico/strumentale e clinico/diagnostico, il modulo ICRM intende realizzare: 1) sistemi analitici miniaturizzati, basati su sistemi microchip per l'analisi parallela, quantitativa e sensibile di piccole quantità di sostanze biologiche (DNA, proteine, etc); 2) nuove superfici e materiali funzionali; 3) sintesi di apteni derivatizzati, di marcatori di fluorescenza a risoluzione di tempo e ottimizzazione del dosaggio. Il modulo ISTM ha come obiettivo come obiettivo 1) la sintesi e l'utilizzo come sonde molecolari di PNA marcati con ferrocene, 2) lo sviluppo di metodi di rilevazione elettrochimici al posto di quelli ottici. Il PNA garantisce rispetto al DNA, una migliore stabilità alle proteasi, una maggiore specificità e affinità di legame con DNA e RNA. I metodi elettrochimici promettono grande sensibilità e vantaggi economici di automazione.

Risultati attesi nell'anno

a) Nuovi protocolli di separazione di campioni con mutazioni provenienti da pazienti affetti da beta talassemia e fibrosi cistica. Lo scopo della ricerca è quello di utilizzare queste separazioni come modelli per migliorare la comprensione delle problematiche relative, b) la messa a punto di metodi non convenzionali di polimerizzazione radicalica e la comprensione della relazione tra proprietà reologiche degli stessi e la loro capacità di seccare il DNA in elettroforesi capillare, c) informazioni sulla struttura di film polimerici sottili che costituiscono i rivestimenti funzionali sviluppati all'interno della commessa, realizzazione di nuovi rivestimenti potenzialmente trasferibili sul piano industriale. c) Sintesi di oligomeri di PNA di opportuna sequenza contenenti una o più unità trisferroceniche, valutazione della risposta elettrochimica e dell'intervallo di rilevabilità in differenti solventi ed in particolare in acqua. Determinazione della affinità di binding con sequenze complementari di DNA e analisi elettrochimica dei duplex PNA/DNA in vista di una successiva applicazione in test diagnostici.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Si ipotizza il trasferimento di alcuni dei prodotti sviluppati all'interno della commessa nel settore della diagnostica clinica e della life science, in particolare potranno essere portati sul mercato vetrini per tecnologia microarray, Kit per diagnostica molecolare, matrici seccanti per elettroforesi e metodi di rivestimento di microcanali.



- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Le nuove tecnologie analitiche high-throughput, quali i microarrays e lamicrofluidica in sistemi lab-on-a-chip, sono destinate ad alzare il livello della conoscenza delle molecole costituenti gli organismi viventi fornendo enormi potenzialità per l'identificazione di nuovi target farmaceutici e per la comprensione delle reti di regolazione a livello dei profilogenetici e proteici.

Moduli

Modulo: Sintesi di materiali funzionali e sviluppo di sistemi analitici miniaturizzati

Istituto esecutore: Istituto di chimica del riconoscimento molecolare

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Sintesi di sonde molecolari

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
287	55	163	66	571	28	246	46	N.D.	645

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
4	6

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	2	1	3	0	0	0	0	0	6

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	2	0	3

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Strutturistica NMR e modellistica molecolare di proteine legate a processi patologici

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio delle macromolecole
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	LUCIA ZETTA

Elenco dei partecipanti

Amore Paola	liv. VII	Colombo Giorgio	liv. III	Motta Andrea	liv. II
Andreotti Giuseppina	III	Consonni Roberto	III	Provasoli Francesco	IV
Bergamini Natalina	V	De Rosa Maria Cristina	III	Ragona Laura Giuditta	III
Bonassi Palmira	IV	Greco Fulvia	V	Sampaolese Beatrice	V
Branaccio Andrea	III	Italia Salvatore	V	Secondi Pietro	IV
Cam Davy	VII	Izzo Mario	VII	Tarchi Francesca	VII
Castelluccio Emilio Paolo	VI	Longhi Renato	IV	Zambardino Salvatore	V
Castoldi Elena	VII	Melck Dominique Juliette	VI	Zannoni Giulio	IV
Clementi Maria Elisabetta	II	Mirra Vincenzo	VI	Zetta Lucia	II

Temi

Tematiche di ricerca

-Espressione di proteine ricombinanti e loro mutanti (mutazioni specifiche per folding e/o per funzione) arricchiti in ^{13}C e ^{15}N per studi NMR; -Risoluzione della struttura mediante esperimenti NMR multidimensionali; -Caratterizzazione di mobilità e flessibilità e comprensione del ruolo che le proprietà dinamiche hanno nella funzione; -Caratterizzazione del binding proteina-ligando -Studio di aggregazione, folding e refolding, con l'individuazione di intermedi eventualmente presenti-Rational design di nuovi leganti con proprietà antitumorali-Studio delle basi molecolari della patologia di Alzheimer in colture primarie e secondarie -Produzione di anticorpi

Stato dell'arte

Nell'ultimo decennio la genomica e la proteomica hanno prospettato nuove ed interessanti strategie di prevenzione, diagnostica ed intervento verso numerose malattie umane con basi genetiche. In questo obiettivo giocano ruoli importanti la biologia molecolare per la produzione di proteine e mutanti, l'NMR per la caratterizzazione strutturale, dinamica e funzionale di proteine in soluzione, i metodi computazionali per la previsione di struttura.

Azioni

Attività da svolgere

L'attività sarà svolta attraverso le seguenti azioni:-espressione di proteine e loro mutanti arricchiti in ^{13}C e/o ^{15}N per studi NMR -studio del meccanismo di 'folding' di proteine legate a patologie neurodegenerative - sviluppo della teoria e della previsione di folding di proteine -studio delle basi molecolari responsabili di attività angiogenica o antitumorale -caratterizzazione dell'interazione mediante tecniche spettroscopiche classiche e NMR -definizione di un database di interazioni proteina/proteina -test di vitalità cellulare per l'individuazione di molecole ad azione farmacologia -mapping di antigeni tumorali -sintesi e test biologici di peptidi autoimmunogenici -proteomica di liquidi biologici -definizione dei determinanti di sequenza dell'aggregazione -design e sintesi di peptidi antiaggregazione -trasfezione e selezione di linee cellulari animali stabili carrier di forme mutate del gene del distroglicano - produzione ed analisi di topi transgenici carrier di mutazioni nella regione di interazione tra le subunità alfa e beta del gene del distroglicano - produzione di anticorpi.

Punti critici e azioni da svolgere

Nel complesso la commessa non presenta criticità di rilievo poiché molte delle attività sono attualmente in corso. Va però segnalata 1.la necessità di strumentazione NMR adeguata al progetto di ricerca proposto, mancando all'interno del CNR spettrometri con campi magnetici al di sopra di 600 MHz. Azione da svolgere: 'upgrading' dei laboratori NMR2. la mancanza di risorse umane e di finanziamenti cnr necessari. Azione da svolgere: aumento del finanziamento per personale e bench-fees



Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

I partecipanti alla Commessa sono altamente qualificati in campo nazionale ed internazionale nel settore della proteomica strutturale (PS):-nel 2005 hanno pubblicato 44 lavori in riviste internazionali con IF > 4 - sono responsabili di unità in progetti CEE attinenti all'area Salute -sono responsabili di progetti FIRB e MIUR, aventi come tema la PS nell'ambito Salute -hanno accesso alle Large Scale Facilities -fanno parte del Comitato Organizzatore di convegni nazionali ed internazionali attinenti alla PS -sono referee di riviste specialistiche nell'ambito della PS e campi affini -sono invitati a presentare comunicazioni orali a convegni nazionali ed internazionali -hanno collaborazioni attive con l'industria e con università italiane e straniere - depositano strutture di proteine nel PDB. La tecnologia di cui fanno uso è d'avanguardia, mentre le tecniche d'indagine a loro disposizione non sempre sono adeguate. In particolare gli spettrometri NMR sono obsoleti (ISMAC) o del tutto assenti(ICRM). Questo è un problema generale del CNR che non ha a disposizione, in tutta Italia, apparecchiature NMR proprie con campi magnetici >600 MHz

Collaborazioni (partner e committenti)

Dip. Scientifico e Tecnologico UNI Verona, H. Molinari; Dip. Scienze e Tecnologie Chimiche, UNI Tor Vergata Roma, M. Paci, D. Cicero; Fond. Maugeri Pavia, A. Lanza; Ist. Sperimentale Culture Foraggiere Lodi, Aldo Tava; Dip. Biologia e Biochimica Molecolare UNI Bari, R. Gallerani; Ist. Biomembrane e Bioenergetica, CNR Bari, L. Ceci; Dip. Scienze e Tecnologie Biomediche, UNI Milano, M. Gussoni; Dip. Biotecnologie e Bioscienze, UNI Milano-Bicocca P. Tortora, P. Fusi; IRCCS DIBit, HSR milano; Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, e Dipartimento di Medicina Sperimentale e Scienze Biochimiche, Univ. di Roma Tor Vergata; Istituto di Farmacologia ed Istituto di Fisiologia, UCSC di Roma University of Massachussets, school of medicine.

Finalità

Obiettivi

Definire le basi molecolari di eventi biologici coinvolti in alcune patologie molto diffuse quali quelle neurodegenerative, tumorali, virali o legate all'ipossia, mediante studi strutturali, computazionali e funzionali di biomolecole.

Risultati attesi nell'anno

I risultati attesi in ordine cronologico sono: 1)Comprensione della relazione struttura-funzione di proteine coinvolte in processi neurodegenerativi, virali, tumorali da ipossia. 2)Sviluppo di nuove strategie di prevenzione, diagnostica ed intervento verso innumerevoli malattie umane con basi genetiche.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Ricadute nel settore biomedico, farmaceutico, biotecnologico, salute dell'uomo, qualità della vita

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Ricadute- economiche in campo biomedico, farmacologico e biotecnologico: produzione, identificazione e screening di farmaci; - sociali: sviluppo di nuovi farmaci destinati al miglioramento delle terapie associate a patologie neurodegenerative, tumorali, virali o legati all'ipossia; miglioramento della qualità della vita; - scientifiche: arricchimento di banche dati con nuove strutture proteiche; creazione di software a disposizione della comunità scientifica nazionale e internazionale

Moduli

Modulo: Studi Struttura - Funzione di Proteine per lo Sviluppo di Terapie per Patologie Neurodegenerative, Tumorali o legate all'ipossia
Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Studi Struttura - Funzione di Proteine per lo Sviluppo di Terapie per Patologie Neurodegenerative, Tumorali o legate all'ipossia
Istituto esecutore: Istituto di chimica del riconoscimento molecolare
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Studi Struttura - Funzione di Proteine per lo Sviluppo di Terapie per Patologie Neurodegenerative, Tumorali o legate all'ipossia
Istituto esecutore: Istituto per lo studio delle macromolecole
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
703	308	154	21	1186	54	516	151	N.D.	1391

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
8	18

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
2	3	5	4	0	0	1	0	7	22

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
4	5	4	13

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Interazioni legando-recettore: studi spettroscopici, fotofisici e conformazionali e modelli per fenomeni di adesione cellulare

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	SANDRA MONTI

Elenco dei partecipanti

Cortesi Roberto	liv. VII	Manet Ilse Gert	liv. III	Monti Sandra	liv. II
Dall'Olio Alessandra	VI	Manoli Francesco	V		
Manderioli Anita	IV	Marconi Giancarlo	II		
		Minghetti Maurizio	VII		

Temi

Tematiche di ricerca

Studio dell' interazione di farmaci chirali con proteine e ciclodestrine. Sviluppo di calcoli conformazionali di docking per l' interpretazione delle proprietà dei sistemi associati. Sviluppo di un metodo nuovo di light scattering per la misura delle costanti di binding in sistemi nanostrutturati. Messa a punto delle tecniche necessarie per l' indagine spettroscopica di sistemi nanostrutturati. Estensione degli studi al binding di legandi a proteine di membrana e ad altri sistemi quali coppie antigene-anticorpo, enzimi-substrati, DNA-proteine.

Stato dell'arte

La comprensione delle conseguenze chimiche delle interazioni non covalenti tra biomolecole e dei processi di riconoscimento stereoselettivo (ad es. di farmaci) necessita di studi quantitativi per quanto riguarda il binding e la caratterizzazione delle specie associate. I metodi finora proposti per quantificare le interazioni legando-recettore (microcalorimetria, spettroscopie UV, massa, NMR, CD, fluorescenza, tecniche varie di analisi superficiale) hanno caratteristiche specifiche rispetto ai fenomeni osservati e talvolta mostrano bassa sensibilità, inadeguata riproduzione delle condizioni fisiologiche, difficoltà di uso. C' è pertanto una continua ricerca di nuove metodologie capaci di rivelare il binding e, possibilmente, misurare le costanti e caratterizzare i sistemi associati dal punto di vista chimico-strutturale.

Azioni

Attività da svolgere

Studio dell' interazione stereoselettiva di farmaci fotosensibilizzanti, quali antiinfiammatori non steroidei e chinoloni, con proteine di trasporto (BSA, HSA) e ciclodestrine mediante dicroismo circolare e fluorescenza. Studi fotochimici dei suddetti sistemi per contribuire a chiarire il meccanismo delle reazioni di fotosensibilizzazione/fotoallergia indotte da questi farmaci. Studio della relazione struttura-attività di farmaci antimalarici, quali licocalcone, tapsigargina, artemisinina e derivati e studio dell' associazione ad emorecettori. Sviluppo di calcoli conformazionali di docking per l' interpretazione delle proprietà spettroscopiche e fotochimiche dei sistemi associati. Perfezionamento del metodo di light scattering per la misura di costanti di binding fra biomolecole e/o farmaci su nanoparticelle funzionalizzate. In particolare, si estenderà la metodologia a coppie carboidrato-proteina attraverso lo studio del binding di lettine vegetali a substrati mono e/o oligosaccaridici, a sistemi enzima-substrato, allo studio di DNA strands. Si intende inoltre valutare l' applicabilità della tecnica allo studio dell' associazione di farmaci a sistemi proteici di trasporto.

Punti critici e azioni da svolgere

Occorre che si sviluppi una maggiore interazione con chimici di sintesi e/o chimici farmaceutici per avere disponibilità di prodotti puri, quando non commerciali. In questa direzione si intende continuare a collaborare con l' ICB di Catania in cui si trovano competenze nella separazione enantiomerica di farmaci e con il dipartimento di Scienze Farmaceutiche dell' Università di Firenze. Occorre intensificare la collaborazione fra i moduli all' interno della commessa per affrontare lo studio del binding in sistemi di comune interesse. Per lo sviluppo della tecnica di light scattering e delle sue applicazioni occorre consolidare la rete interdisciplinare di ricerca coinvolgendo gruppi di area più prettamente fisica e biologica. Tale network si è già costituito nell'area milanese ed ha ricevuto anche visibilità negli organi di stampa. Sarebbe opportuno



umentare di due unità l'organico di commessa attribuendo un posto di ricercatore a tempo indeterminato a ciascun modulo.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze specifiche dei partecipanti sono di tipo spettroscopico-fotofisico (assorbimento ed emissione stazionari e risolti in tempo, dicroismo circolare(CD)) e computazionale (metodi quantomeccanici semiempirici, ab initio, meccanica molecolare), di chimica organica e di chimica fisica dei colloidi. Lo studio del riconoscimento diastereoselettivo da parte di albumine e di ciclostreptine nei confronti di farmaci dotati di elementi stereogenici (es. chetoprofen e artemisinina), effettuato in soluzione, è basato sull'uso del CD, della fluorescenza e sull'analisi globale dei dati spettrali. Con questo approccio si ottengono le costanti di binding relative ai siti di maggiore affinità e si caratterizzano spettroscopicamente i relativi complessi. In sistemi di nanoparticelle sferiche disperse in acqua, ricoperte di uno strato di molecole opportunamente funzionalizzate, si studia la diffusione della luce laser a 633 nm. Ciò permette di quantificare l'avvenuta adesione dei legandi presenti in soluzione, di determinare la costante di affinità per tale interazione e di chiarire il meccanismo di riconoscimento a livello molecolare.

Collaborazioni (partner e committenti)

ISTM-Milano effettua lo studio della diffusione della luce laser sulle nanoparticelle rivestite di uno strato di molecole opportunamente funzionalizzate, quantificando l'avvenuta adesione di legandi in soluzione e determinando la costante di affinità, in collaborazione con gruppi di fisica, chimica e biochimica dell'Università di Milano, Milano-Bicocca, del Piemonte Orientale e dell'Istituto ICRM-CNR. I dati spettroscopici ottenuti all'ISOF contribuiscono a validare il metodo di light scattering per la misura di costanti di binding, prerequisito in vista della ingegnerizzazione della tecnica. Lo studio spettroscopico e fotofisico di sistemi coinvolgenti farmaci chirali e proteine effettuato all'ISOF è condotto in collaborazione con l'ICB-Catania, che fornisce farmaci enantiomericamente puri quando non commerciali, e con il Dipartimento Chimico dell'Università di Catania.

Finalità

Obiettivi

Lo scopo è quello di acquisire informazioni sull'interazione di legandi con recettori di interesse biologico, misurare costanti di binding, acquisire informazioni spettroscopiche, fotofisiche e conformazionali che consentano una caratterizzazione strutturale delle specie associate. Si intende sviluppare un metodo nuovo di misura delle costanti di binding su sistemi nanostrutturati nelle sue valenze di ricerca e ricadute tecnologiche.

Risultati attesi nell'anno

Come principali prodotti dell'attività del modulo si attendono pubblicazioni su riviste internazionali, comunicazioni a congressi ed eventualmente un brevetto. Lo studio del binding e della fotoreattività di altri sistemi farmaco-proteina (FANS e chinoloni su albumine) dovrebbe dare ulteriori contributi alla conoscenza delle interazioni che sono alla base delle reazioni di fotosensibilizzazione e di fotoallergia. La relazione fra la struttura chimica ed il binding dei derivati dell'artemisinina a recettori di interesse biologico dovrebbe dare informazioni utili alla comprensione del meccanismo di azione di questi farmaci, attualmente di grande interesse farmacologico. L'estensione della metodologia di light scattering su nanoparticelle allo studio del binding in ulteriori coppie legando-recettore contribuirà al perfezionamento del metodo ed alla definizione delle sue potenzialità applicative.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Sviluppo di un dispositivo per la misura di affinità di binding, nanoparticelle, vancomicina. Progettazione di nuovi farmaci.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Allargamento delle conoscenze sui processi di riconoscimento legando-recettore e sul ruolo delle interazioni stereospecifiche.

Moduli

Modulo:	Interazioni legando-recettore: studi modellistici spettroscopici, fotofisici e conformazionali
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto



Modulo: Interazioni legando-recettore: studi modellistici spettroscopici, fotofisici e conformazionali
Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
265	110	0	0	375	12	122	95	N.D.	482

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
3	5

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	1	0	0	0	1

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	2	2	4

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Lipidomica, genomica e proteomica dello stress radicalico cellulare e biomarker correlati.

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	CHRYSSOSTOMOS CHATGILIALOGLU

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Bragaglia Giovanni	V	Dellonte Sergio	II	Navacchia Maria Luisa	III
Chatgialloglu	I	Favaretto Silvano	V	Tamba Maurizio	I
Chryssostomos		Ferreri Carla	III	Torreggiani Armida	III
Chiodini Roberta	VIII	Ghirardelli Maurizio	VIII		
D'Angelantonio Mila	III	Guerra Maurizio	I		
Dall'Olio Alessandra	VI	Manderioli Anita	IV		

Temi

Tematiche di ricerca

Due workplans paralleli saranno realizzati nel progetto: WP1 - Indagine lipidomica su membrane cellulari esposte ad insulti radicalici. Costruzione di una libreria di lipidi modificati per studi di struttura, interazioni biologiche e trasformazioni enzimatiche in correlazione a stati patologici. WP2 - Indagine genomica legata al danneggiamento del DNA. Formazione per via radicalica di unità 5,8-ciclopuriniche e proposti come indicatori del danno ossidativo del DNA.

Stato dell'arte

Il progetto si affianca agli studi che i ricercatori della commessa eseguono nell'ambito di due network finanziati dalla EU attivi nei prossimi anni. Inoltre, le collaborazioni con partners industriali (Euticals group SpA, Varese; Biochimici PSN, Bologna) permetteranno di sviluppare la piattaforma biotecnologica in senso applicativo in diagnostica, farmacologia e nanomedicina.

Azioni

Attività da svolgere

La tematica della reattività radicalica correlata a sistemi biologici è focalizzata attualmente al danno radicalico apportato a lipidi insaturi e nucleosidi. L'approccio interdisciplinare utilizza lo studio chimico-meccanicistico dei processi, la caratterizzazione dei prodotti e gli studi biochimici e farmacologici per valutare l'influenza della modificazione strutturale sull'attività biologica.

Punti critici e azioni da svolgere

L'analisi lipidomica potrebbe avvalersi di una procedura automatizzata e si richiede un partner interessato allo sviluppo di automatismi in tale campo. Inoltre la fattibilità dell'inserimento della banca dati dello stress radicalico in reti neurali artificiali, renderebbe efficace una globale valutazione dei fattori che concorrono al miglioramento della qualità della vita. L'adeguatezza del personale, mantenuta o migliorata rispetto ai numeri attuali renderebbe più fattibile il progetto.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Collaborazioni (partner e committenti)

La collaborazione con divisioni mediche avverrà su screening di patologie umane correlate a infiammazione ed invecchiamento. In collaborazione con il partner industriale, alcuni ciclonucleosidi saranno valutati per applicazioni di farmaco-genomica. La collaborazione industriale nel campo delle formulazioni nutraceutiche, prevede la messa a punto di integratori dietetici ad hoc, per la protezione della struttura dei lipidi e coadiuvanti di terapie antinfiammatorie.



Finalità

Obiettivi

L'obiettivo è l'acquisizione di dati sulle trasformazioni del corredo cellulare e metabolico legate allo stress radicalico, per fornire le basi molecolari a processi degradativi cellulari ancora non chiariti, riferiti a stati patologici ed invecchiamento. Sono utilizzate competenze di tipo chimico, cinetico-meccanicistico su specie radicaliche, nonché biochimico e biotecnologico e sono previste collaborazioni per competenze in campo medico, biologico e nanotecnologico.

Risultati attesi nell'anno

Preparazione di librerie di lipidi e nucleosidi modificati ed impiego come markers (1-3 anno); studio del danno accoppiato lipidi/proteine [β -amiloide (Alzheimer), proteina prionica (Cruetzfeldt) e TAT (virus HIV)] (1-3 anno); studi strutturali biochimici e biologici del danno radicalico e sistemi di riparazione (2-3 anno); applicazione di sistemi trasportatori di elettroni alla nanomedicina (1-3 anno). Il risultato generale atteso è la mappatura dello stress radicalico cellulare.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Modulo: Indagine lipidomica su membrane cellulari esposte ad insulti radicalici e correlazione con il danneggiamento delle proteine
Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Indagine genomica correlata al danneggiamento del DNA provocato da attacchi radicalici
Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e fotoreattività
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
608	233	65	0	906	63	361	196	N.D.	1165

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
8	9

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	0	0	0

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Chemical genetics e genomica dell'interazione proteine-ligandi

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	LEONARDO PIERPAOLO MANZONI

Elenco dei partecipanti

Cutignano Adele	liv. III	Gambacorta Agata	liv. I	Manzoni Leonardo	liv. III
De Giulio Alfonso	III	Maiello Antonio	VI	Pierpaolo	
Fontana Angelo	III	Manzo Emiliano	III	Monti Diego	I
				Ognibene Barbara	VII

Temi

Tematiche di ricerca

L'identificazione del meccanismo d'azione di un composto chimico è un processo oggi assistito dall'interazione tra la genomica e la chimica combinatoriale. La nuova frontiera della drug discovery è disporre di molecole (potenziali farmaci) corredate da dati biochimici che consentano l'identificazione di target e di meccanismi d'azione di composti chimici. La chemical genetics ha lo scopo di individuare piccole molecole in grado di inattivare specificamente l'espressione di particolari geni.

Stato dell'arte

Vi sono settori dove la competenza chimica si deve associare a competenze biochimiche, biologiche e di genetica molecolare. Nell'ambito della Chemical Biology, Chemical Genetics, Ingegneria Metabolica e Biosintesi Combinatoriale, la posizione Italiana è fortemente carente o quasi nulla. Nell'ambito strettamente chimico occorre sviluppare settori avanzati della Sintesi Innovativa Target e Diversity Oriented utili nella chemical biology e genomics, proteomica, biologia e medicinal chemistry.

Azioni

Attività da svolgere

Modulo di attività 1 'Genetica chimica di una pianta modello e sua applicazione al drug discovery': Individuazione e messa a punto di un sistema di HTS delle librerie già in possesso. Sintesi in soluzione e su fase solida di librerie combinatoriali di peptidomimetici ispirate a strutture di inibitori di integrine. Modulo di attività 2 'Genetica chimica nello studio delle mono-ADP ribosil transferasi': screening delle librerie di molecole già in possesso e progettazione di librerie di III generazione. Individuazione e messa a punto di un sistema di HTS delle librerie.

Punti critici e azioni da svolgere

L'attribuzione di nuovo personale ricercatore con competenze interdisciplinari incentrate sulla chimica organica e bioorganica permetterebbe un'accelerazione nell'ottenimento dei risultati. Una stretta collaborazione con la proposta a tema libero 'Nanoparticelle e microarrays funzionalizzati con pseudopeptidi e mimici di carboidrati per applicazioni biomediche' sarebbe di notevole interesse per lo sviluppo delle tematiche di ricerca proposte dalla commessa e per eventuali temi di ricerca futuri. Le nanobiotecnologie potrebbero essere un ottimo strumento di HTS da applicare al concetto di 'chemical genetics'. Inoltre, le moderne tecniche di indagine rese possibili dalle emergenti nanobiotecnologie fanno prevedere possibili sviluppi in campo biomedico per l'individuazione di composti ad uso sia diagnostico che terapeutico.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi organica tradizionale Sintesi combinatoriale High Throughput Screening Biologia Piattaforme tecnologiche per: Sintesi combinatoriale Microarray technology for DNA expression and genotyping Proteomica Genomica funzionale NMR Bruker Avance 600 MHz HPLC-MS



<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
2	1	3	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Proteomica e Metabolomica

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di provvista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	PIETRO LUIGI MAURI

Elenco dei partecipanti

Benazzi Louise	liv. III	Lupi Alessandro	liv. II	Vitali Alberto	liv. III
Desiderio Claudia	III	Mauri Pietro Luigi	III		
Giannelli Anna Maria	VIII	Patamia Maria	III		
		Rosti Enrico	VI		

Temi

Tematiche di ricerca

La presente commessa di ricerca si occupa di sviluppare tecnologie innovative e di applicarle allo studio di problematiche biomediche nell'ambito della salute. In particolare, si applicano le più recenti metodologie proteomiche e metabolomiche al fine di rendere possibile lo studio di sistemi biologici complessi mediante approccio integrato tra diverse metodologie, basate principalmente sulla spettrometria di massa.

Stato dell'arte

La caratterizzazione delle proteine ha assunto un crescente interesse. Ciò perché le proteine sono i veri effettori delle vie metaboliche, di trasporto e di regolazione. Ciò significa che lo stato fisiologico è caratterizzato da un particolare pattern proteico (Proteoma). Per lo sviluppo di nuovi farmaci è molto importante anche avere a disposizione tecnologie per determinare i livelli di assorbimento nei diversi compartimenti ed eventuali variazioni dei livelli dei metaboliti (metabolomica).

Azioni

Attività da svolgere

Si prevede lo sviluppo degli studi attivati; in particolare: Studio dei processi di glicazione. Identificazione dei cosiddetti "Advanced Glycation End Products(AGE)-peptides", e loro validazione statistica. Questi sono importanti nello studio dei processi di glicazione non enzimatica nel diabete. Inoltre, verranno studiati i siti di glicazione della proteina CD59. Ricerca di proteine diagnostiche nello sviluppo di tumori. Ricerca, anche in fluidi biologici, di proteine e/o peptidi che permettano una diagnosi precoce e veloce dello sviluppo tumorale (colon-rettile, pancreas e stomaco). Proteomica salivare. Caratterizzazione dei complessi proteici salivari e studio della struttura-dunzione di alcuni peptidi salivari. Applicazione della tecnologia MudPIT per lo studio di sub-proteomi. Caratterizzazione di complessi proteici e correlazione con la loro funzione; Identificazione delle proteine secrete dalla cellula (secretoma). Biodisponibilità farmaci e loro metabolici. Caratterizzazione di principi attivi in tessuti, correlazione con i livelli plasmatici e con l'attività biologica. Sviluppo di metodologie per l'ottenimento di "mappe metaboliche".

Punti critici e azioni da svolgere

Le collaborazioni ed i risultati scientifici indicano che le infrastrutture e le competenze dei diversi moduli partecipanti alla presente commessa sono di primissimo livello; ma la competizione nazionale ed internazionale nell'affrontare le importantissime tematiche allo studio e correlate alla salute richiedono il miglioramento sia delle quantità minime rilevabili (sensibilità) sia della possibilità di distinguere molecole molto simili (risoluzione) e la possibilità di gestire grandi quantità di dati sperimentali. Tali punti critici possono essere affrontati e risolti con l'incremento di investimenti strumentali ed in nuovo personale al fine di sfruttare al meglio le competenze e le strategie innovative nei progetti attivati.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze del presente modulo riguardano la caratterizzazione e quantificazione di biomolecole (proteine, peptidi e principi attivi con attività farmacologica), sia nella forma nativa che denaturata. Inoltre, le competenze riguardano lo studio delle modifiche post-traduzionali quali la glicazione e gli stati di ossidazione. Le principali tecnologie riguardano diverse metodologie di massa. Inoltre, è disponibile la cromatografia bidimensionale accoppiata alla spettrometria di massa (2DC-MS/MS, detta anche MudPIT). Questa permette



di caratterizzare e quantificare rapidamente un gran numero di proteine presenti nello stesso campione e senza la necessità di isolarle. Un'altra specificità del è rappresentata dall'attivazione del, primo in Italia, cluster di computer dedicato alla elaborazione dei dati di massa per l'analisi proteomica. Nell'ambito dell'analisi metabolica le competenze e le tecnologie riguardano l'analisi rapida (minuti) e sensibile (fmol) di principi attivi e loro metabolici direttamente nei campioni biologici, riducendo al minimo la manipolazione del campione.

Collaborazioni (partner e committenti)

Le collaborazioni più rilevanti sono: Dipartimento di Scienze Mediche e Chirurgiche, Malattie del Metabolismo, Università di Padova; Sezione Clinica Chirurgica II, Dipartimento di Scienze oncologiche e Chirurgiche, Università di Padova; Dipartimento di Farmacologia e Anestesiologia, Università di Padova; Tossicologia Forense e Antidoping, Azienda Ospedaliera di Padova, Padova; Harvard Medical School Istituto di Biochimica e Biochimica Clinica, Facoltà di Medicina, Università Cattolica, Roma; G. Paludetti, Ist. Otorinol., G. Ferraccioli, Ist. Reumatologia, C. Romagnoli, Ist. Pediatria, Roma - Cattolica University of Goteborg (Sweden); Istituto di Chimica Farmaceutica e Tossicologica, Università di Urbino; Dip. Scienze Appl. Biosistemi, Univ. Cagliari. Dip. Scienze e Tecnol. Chimiche, Roma - Tor Vergata; Dip. Biochimica, Università di Padova; Dip. Patologia Università di Verona; Istituto G. Gaslini, Genova; Strahlenklinik, Essen (Germany); European JRC, Petten (NL); Ospedale S. Matteo-Pavia; INN-CNR - Cagliari; Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze Università di Milano- Bicocca

Finalità

Obiettivi

I principali obiettivi sono: Sviluppo di tecnologie per l'analisi proteomica e metabolica. Integrare le tecnologie, al fine di fornire un approccio sinergico allo studio dei sistemi biologici e delle attività dei farmaci. Consolidare le collaborazioni in atto ed attivarne di nuove. Le competenze disponibili nel gruppo riguardano sia tecniche tradizionali (elettroforesi in gel e capillare, HPLC), sia quelle più innovative: a) la cromatografia 2D accoppiata alla tandem mass spectrometry.

Risultati attesi nell'anno

I risultati attesi riguardano principalmente l'incremento delle conoscenze scientifiche; in particolare: caratterizzazione strutturale/funzionale di proteine e peptidi (in vitro e/o in vivo) correlati alle tematiche proposte (diabete, proteomica salivare, complessi enzimatici, ecc.); individuazione e validazione di mappe proteiche e marcatori correlati a tumori (rettale, pancreatico e gastrico); descrizione della biodisponibilità di principi attivi (ad es. terpenlattoni naturali) in tessuti e fluidi biologici. Indice della validità dell'attività svolta e dei risultati scientifici ottenuti saranno sia le pubblicazioni, sia le presentazioni a congressi internazionali sia l'attivazione di nuovi contratti/collaborazioni di ricerca. Inoltre, tra i risultati attesi si prevede la realizzazione della diffusione ("dissemination") delle metodologie della commessa sia attraverso la formazione di personale (tesisti, stagisti e dottorandi) sia mediante seminari e corsi teorico-pratici. Ciò è molto importante per aumentare quali-quantitativamente l'accesso di gruppi di ricerca alle nuove tecnologie.

Potenziale impiego

-per processi produttivi

Dalla individuazione dei biomarcatori si potranno progettare e produrre nuovi farmaci specifici. La caratterizzazione del metabolismo (biodisponibilità e metabolici) dei principi attivi fornisce dati importanti per il miglioramento e/o messa a punto della produzione.

-per risposte a bisogni individuali e collettivi

Sviluppo di metodologie di indagine per la identificazione di marcatori diagnostici. Individuazione di parametri diagnostici che permetteranno una preventiva, rapida e specifica individuazione dell'insorgenza di malattie. L'aumento delle conoscenze correlate al metabolismo dei farmaci permetterà il dosaggio personalizzato.

Moduli

Modulo:	Proteomica e Metabolica
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Roma
Modulo:	Proteomica salivare
Istituto esecutore:	Istituto di chimica del riconoscimento molecolare
Luogo di svolgimento attività:	Sezione di Roma



Modulo: Proteometabolomica
Istituto esecutore: Istituto di tecnologie biomediche
Luogo di svolgimento attività: Sezione di Roma

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
356	285	179	0	820	50	514	76	N.D.	946

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
6	8

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	1	0	0	0	0	6	7

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
1	2	3	6

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Genomica

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	GIANLUCA DE BELLIS

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Albertini Alberto	DIRE	Cerruti Claudio	I	Orlando Maria Grazia	VI
Benazzi Louise	III	Consolandi Clarissa	III	Scrollini Eva	III
Boschetti Giuseppe	V	De Bellis Gianluca	III	Torti Mariagiovanna	VI
Caramenti Gian Carlo	VIII	De Giovanni Umberto	V		
Carmarino Silvana	VI	Di Carlo Michela	VI		
		Gambirasio Francesco	VII		

Temi

Tematiche di ricerca

La presente macroarea di ricerca si occupa di sviluppare tecnologie innovative e di applicarle allo studio di problematiche biomediche nell'ambito della salute. In particolare, si applicano le più recenti metodologie genomiche, bioinformatica al fine di rendere possibile lo studio di sistemi biologici complessi mediante approccio integrato tra diverse metodologie. Di particolare interesse la ricerca di geni candidato in patologie neurologiche

Stato dell'arte

Lo sviluppo di nuovi farmaci o composti bioattivi richiede sia in fase di progettazione che in fase di validazione l'utilizzo di strumenti concettuali e analitici precedentemente indisponibili. L'indagine genomica, proteomica e metabolomica costituiscono il fondamento per l'individuazione di nuovi bersagli molecolari.

Azioni

Attività da svolgere

L'attività in corso riguarderà i progetti FIRB attualmente in corso ed in particolare il FIRB 2001 Blochip e Micran per lo sviluppo delle tecnologie ad array e delle applicazioni biomediche delle microtecnologie e il progetto FIRB 2003 NG-Lab Grandi laboratori che prevede la creazione di un laboratorio congiunto con il>NNL di Lecce

Punti critici e azioni da svolgere

Punti critici Le infrastrutture analitiche sono di primissimo livello e sono state ultimamente ulteriormente migliorate con l'acquisto di un sistema di sequenziamento 454 GS20 che è il primo del genere in Europa e il secondo al mondo. Il riconoscimento di questo laboratorio come 'large scale facility' di genomica con gli opportuni investimenti in termini di dotazione ordinaria e di personale strutturato, permetterebbe di sostenere il salto di qualità verso la realizzazione di un centro di genomica di livello internazionale

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Questo modulo si incentra sulle tecnologie ad array e si fonda sull'array technology group gestito con il Dipartimento di scienze e tecnologie biomediche dell'università di Milano. In tale laboratorio sono presenti attrezzature di alto livello per tutte le fasi della ricerca e attrezzature più specificamente utilizzate per la generazione e l'utilizzo di microarray quali depositori (arrayers, Gesim e Biorobotics) laser scanners (Quanta System, GSI Lumonics) sistemi per ibridazione in ambiente controllato GeneTac, sistemi a Bead array (Bioplex Biorad) e un sistema di ultima generazione Affymetrix. Oltre a ciò è presente il sequenziatore ultramassivo Roche GS20

Collaborazioni (partner e committenti)

IRCSS Università (sia nazionali che internazionali) Altri enti di ricerca (sia nazionali che internazionali)
Imprese ST Microelectronics UniMi UniPd Scuola Sup. S. Anna Pisa>NNL lab Lecce Sanofi Aventis
Brindisi Scuola Normale Pisa UniCa



Finalità

Obiettivi

Sviluppo di tecnologie di indagine genomica basate su microarray -tecniche di identificazione di target ad alta sensibilità -tecniche di marcatura anche con materiali nanotecnologici -tecniche di analisi del segnale -tecniche di disegno sperimentale DOI Applicazione delle tecnologie microarray in contesti con ricadute - Identificazione di target in ambito tumorale (tumore al rene e mammella) - Identificazione di geni candidato (es schizofrenia)

Risultati attesi nell'anno

Sviluppo di tecnologie di indagine genomica basate su microarray Nuove applicazioni legate alla piattaforma di sequenziamento ultramassivo Pubblicazioni su riviste scientifiche

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Produzione di nuovi farmaci

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

miglioramento della salute umana

Moduli

Modulo: Tecnologia ad Array
Istituto esecutore: Istituto di tecnologie biomediche
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Sviluppo di un cyberspazio per l'alta formazione e le tecnologie didattiche
Istituto esecutore: Istituto di tecnologie biomediche
Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
379	87	130	0	596	1053	1270	64	N.D.	1713

valori in migliaia di euro

Unità di personale di ruolo*	
ricercatori	Totale
4	9

*equivalente tempo pieno

Unità di personale non di ruolo									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	5	0	0	0	2	0	7

Richiesta nuove unità di personale			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
8	6	3	17

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Bioinformatica e modellistica molecolare

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	LUCIANO MILANESI

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Albertini Alberto	DIRE	Cerruti Claudio	I	Hatton John Timothy	VI
Amato Umberto	II	De Candiitiis Daniela	III	Milanesi Luciano	III
Angelini Claudia	III	De Leo Luciano	VII	Rovida Ermanna	III
Biunno Ida	III	Di Carlo Michela	VI	Torti Mariagiovanna	VI
Carmarino Silvana	VI	Gambirasio Francesco	VII	Vesely Sara	III

Temi

Tematiche di ricerca

L'analisi chimica e strutturale del DNA ha assunto negli ultimi anni un ruolo fondamentale nella ricerca biomedical, di conoscenza delle malattie genetiche e per l'identificazione di nuovi farmaci. Nell'ambito di questo progetto saranno sviluppati programmi e banche dati di bioinformatica nell'ambito di un Laboratorio Interdisciplinare di Tecnologie Bioinformatiche (LITBIO) per la ricerca Genomica e Proteomica e per lo studio delle reti geniche nell'ambito della System Biology.

Stato dell'arte

Il numero dei super-calcolatori dedicati alla bioinformatica ed alla modellistica molecolare per l'analisi del genoma umano e per lo studio di nuove molecole è in continuo aumento in tutto il mondo. Questo sforzo deriva dall'aumento della quantità di dati e dei tempi di analisi necessari per lo studio di nuovi genomi e di nuove molecole utili per la realizzazione di nuovi farmaci, per lo studio di reti geniche e metaboliche, per l'analisi di espressione genica, per la proteomica.

Azioni

Attività da svolgere

I partecipanti sono impegnati nei seguenti progetti: Progetto FIRB: Creazione di un Laboratorio Interdisciplinare di Tecnologie Bioinformatiche (LITBIO) per la ricerca Genomica e Proteomica. Progetto FIRB 'Tecnologie abilitanti per la Società della conoscenza ICT'. Piattaforme abilitanti per griglie computazionali a elevate prestazioni orientate a organizzazioni virtuali scalabili. Progetto Europeo 'Building a comprehensive model of mammalian cell-cycle regulatory network'.

Punti critici e azioni da svolgere

Verrà progettato un supercomputer appositamente studiato per applicazioni Bioinformatiche, e successivamente interconnesso con altre importanti risorse bioinformatiche. Verrà realizzato una infrastruttura basata sulla tecnologia GRID al fine di utilizzare le risorse di calcolo distribuito in Italia ed in Europa. Verranno realizzati programmi e banche dati per la System Biology. Verrà realizzato un data center per la gestione dei dati provenienti dal sequenziamento di nuovi genomi.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Le competenze tecnologiche sono nel settore della Bioinformatica applicata all'analisi del genoma e proteoma. Sviluppo di data mining a banche dati per la classificazione e la ricerca di geni, e la caratterizzazioni di domini proteici. Sviluppo di programmi per l'analisi di sequenze del genoma e la predizioni di geni in diversi organismi. Determinazione della funzione genica, predizione delle zone promotrici, analisi dell'espressione genica e sviluppo di programmi di data-mining per la ricerca full-text nella letteratura biomedica. Sviluppo di piattaforme abilitanti per il calcolo ad alte prestazioni GRID orientate alle organizzazioni virtuali e alle applicazioni di Bioinformatica distribuita.

Collaborazioni (partner e committenti)

Le collaborazioni saranno particolarmente attive per la realizzazione di: Un laboratorio pubblico privato dedicato alla Bioinformatica (LITBIO) committente FIRB-MIUR, in collaborazione con il CILEA, CNR-IST Genova, Università di Camerino e Genova, Università di Napoli. MIUR CNR "Genetica Molecolare", MIUR



“O2I” Online Research Information Environment for the Life Sciences; 2003-2005 MIUR CNR “Genomica Funzionale” MIUR Bioinformatica nell’ambito del progetto del Centro di Eccellenza Universitario CISI “Centro Interdisciplinare per gli Studi Bio-molecolari e le applicazioni Industriali.”; European Commission ORIEL 'an Online Research Information Environment for the Life Sciences'. NATO Science Programme “computer modelling, 5’-UTR, co-expressed genes, macrophages, Gene networks, Epstein-Barr Virus, cis elements recognition, B-DNA conformation”; European Commission INTAS “Modelling and analysis of mammalian cell-cycle regulatory networks in normal and pathological states by bio- and chemoinformatics”. MIUR FIRB Post-Genoma “Bioinformatica per la Genomica and la Proteomica”; MIUR FIRB “GRID-IT: Piattaforme abilitanti per il calcolo ad alte prestazioni.

Finalità

Obiettivi

Realizzazione di: - un sistema di calcolo ad alte prestazioni per l’analisi bioinformatica genomica; - un sistema per il trattamento dei dati provenienti da sequenziatori di nuova generazione e Data mining per lo studio degli ‘SNP’ - uno studio della variazione strutturale nelle proteine causate da mutazioni puntiformi. - uno studio strutturale di proteine mutate mediante la dinamica molecolare. - una banca dati per lo studio di domini funzionali in proteine coinvolte nel ciclo cellulare

Risultati attesi nell’anno

Verrà realizzato un sistema di calcolo ad alte prestazioni per l’analisi bioinformatica, tale sistema sarà reso accessibile ai ricercatori a livello internazionale. Verrà organizzato un sistema per il trattamento dei dati provenienti da sequenziatori di nuova generazione per lo studio degli ‘SNP’, per i microarray. Verrà utilizzata la GRID per l’assemblaggio delle sequenze genomiche e per lo studio strutturale di proteine coinvolte in malattie genetiche mediante la dinamica molecolare.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Il progetto proposto sarà di supporto alla ricerca, alla sanità pubblica, alle Università ed Enti Pubblici di Ricerca e alle industrie per lo sviluppo di nuove strategie d’analisi dei dati genomici e proteomici in ambito biomedico e biotecnologico e consentirà di svolgere in modo coordinato attività di ricerca e trasferimento tecnologico ad aziende private, secondo il modello di interazione pubblico-privato in tutte le fasi dello sviluppo della ricerca industriale, sviluppo precompetitivo e innovazione. I sistemi informatici sono sempre più necessari per il trattamento dei dati nell’ambito della biologia molecolare e della medicina.

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

L’enorme flusso di dati di sequenze derivante dai progetti di sequenziamento d’interi genomi di diversi organismi a vari livelli evolutivi, ha posto il problema di analizzare le strutture e le funzioni dei geni. I sistemi informatici sono sempre più necessari per il trattamento dei dati nell’ambito della biologia molecolare e della medicina. La complessità delle informazioni, la considerevole mole di dati disponibili, il loro continuo aggiornamento, la difficoltà d’utilizzo di molti programmi d’analisi utili per indagini in ambito biomedico, rendono di fatto difficoltoso l’uso quotidiano di questi strumenti di indagine diventati ormai indispensabili in molte realtà produttive ed educative. L’introduzione d’avanzate apparecchiature utilizzate nel sequenziamento del DNA ad altissima prestazione complementati dalla produzione di studi d’espressione genica e di proteomica, ha reso evidente la mancanza in Italia di un sistema adeguato per la gestione e analisi dei dati rivolti a sistemi complessi e loro modelli studiati nell’ambito della System Biology.

Moduli

Modulo:	Applicazioni della Bioinformatica e Neuroinformatica al GRID computing
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto
Modulo:	Algoritmi statistici orientati al grid computing per la genetica
Istituto esecutore:	Istituto per le applicazioni del calcolo ‘Mauro Picone’
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto
Modulo:	Genomica, proteomica funzionale e modelling molecolare
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche
Luogo di svolgimento attività:	Sede principale Istituto



Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
291	85	827	0	1203	56	968	63	N.D.	1322

valori in migliaia di euro

<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
4	6

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
0	0	0	5	0	0	0	2	2	9

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	2	2	4

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca



Nanobioteconologie per lo studio delle interazioni molecolari

Dati generali

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti relativi a linee tematiche a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari
Sede principale svolgimento:	Sede principale Istituto
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	DIEGO MONTI

Elenco dei partecipanti

liv.

liv.

liv.

Temi

Tematiche di ricerca

Le tematiche di ricerca riguardano le competenze acquisite nell'ambito dell'adesione cellulare riferite a particolari patologie di origine batterica e ai tumori. Inoltre sono stati sviluppati dei sistemi capaci di misurare le proprietà di binding di macromolecole biologiche attualmente in corso di brevetto e la sintesi di peptido-mimetici a sequenza di riconoscimento RGD capaci di legarsi alle integrine $\alpha_5\beta_3$, sovraesprese sulle membrane di cellule epiteliali in stati infiammatori e tumorali. Ulteriori sviluppi di queste tematiche riguarderanno la preparazione di sonde specifiche per uso biosensoristico e diagnostico.

Stato dell'arte

Le nanobioteconologie sono ampiamente riconosciute come una delle aree più proficue di applicazione delle nanotecnologie. Le nanobioteconologie utilizzano strumenti, materiali e tecnologie di misura proprie della chimica e della fisica dei nanosistemi per studiare le proprietà e il funzionamento di sistemi biologici. La grande potenzialità di queste metodologie è quella di rivelare il funzionamento dei sistemi biologici a livello molecolare, studiando una singola (bio)molecola come una macchina. Le ricadute in campo biomedico di queste ricerche sono già evidenti e potenzialmente enormi per il futuro. Le proprietà uniche dei nanomateriali prodotti per via nanotecnologica possono essere sfruttate in molti campi, per le loro possibili applicazioni in campo medico e biomedico. Un breve elenco delle applicazioni dei nano-biomateriali per la biologia e la medicina include: nuovi marcatori fluorescenti, delivery selettivo di farmaci e di geni, biosensori per la rivelazione di agenti patogeni e proteine, ricostruzione di tessuti, separazione e purificazione di biomolecole e cellule, agenti di contrasto per l'imaging magnetico, studio della fagocitosi.

Azioni

Attività da svolgere

Saranno studiate nanoparticelle come sonde per MRI. Queste saranno costituite da un core metallico e un rivestimento (guscio) ottenuto tramite funzionalizzazione con molecole organiche. In particolare, si prevede di ottenere un substrato organico neutro o anionico (carbossilato) che si è dimostrato efficace in studi precedenti nell'internalizzazione delle nanoparticelle in colture cellulari in vitro ed ex vivo. Tali nanoparticelle metalliche potranno essere ulteriormente coniugate con bio(macro)molecole come carboidrati, peptidi o proteine intere oppure molecole semplici come potenziali ligandi per recettori biologici. La preparazione e manipolazione di queste molecole attive sarà condotta grazie ad elevate competenze di chimica organica di sintesi. Saranno messi a punto nuovi sistemi nanoorganizzati a base organica (es. porfirine) per la diagnostica e il drug delivery.

Punti critici e azioni da svolgere

L'attribuzione di nuovo personale ricercatore con competenze incentrate sulla chimica organica permetterebbe un'accelerazione nell'ottenimento dei risultati. Una stretta collaborazione con la commessa 'Chemical Genetics e genomica dell'interazione proteine-ligandi' sarebbe di notevole interesse per lo sviluppo delle tematiche di ricerca proposte dalla commessa e per eventuali temi di ricerca futuri. La Chemical Genetics potrebbe essere un ottimo strumento per l'individuazione di nuovi lead di interesse farmaceutico. La costituzione di una rete di competenze interdisciplinare, oggi già avviata grazie alle singole collaborazioni di cui dispongono i ricercatori coinvolti nella commessa, è condizione necessaria per la realizzazione di progetti scientifici di grande rilevanza.

Competenze, tecnologie e tecniche di indagine

Sintesi organica tradizionale. Sintesi combinatoriale. High Throughput Screening. Tecniche analitiche (NMR, HPLC, MS, UV, IR, CD, SEM, TEM, ESR). Esperienze acquisite su problematiche biomediche. Le



competenze disponibili sono di livello molto elevato, le infrastrutture esistenti sono di livello mediamente adeguato.

Collaborazioni (partner e committenti)

E' stata stabilita una stretta collaborazione con il centro di eccellenza CISI dell'Università di Milano che metterà a disposizione le piattaforme tecnologiche all'avanguardia di cui dispone per la sintesi e l'analitica. Per la parte di imaging è in atto una collaborazione con Bracco Imaging spa.

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo di questa commessa è lo sviluppo di probes biologici per l'imaging di singole molecole e di cellule (live-cell imaging) e per lo studio del traffico cellulare. Tali probes possono essere ottenuti mediante coniugazione di proteine fluorescenti (Visible Fluorescent Proteins o VFP) o nanoparticelle (quantum dots, nanoparticelle d'oro e/o magnetiche) a piccole molecole organiche che si comportino da leganti ed effettori di biomolecole bersaglio. Questi sistemi possono essere utilizzati sia per lo studio della localizzazione ed internalizzazione dei leganti, che per l'analisi della distribuzione e del funzionamento dei targets macromolecolari anche a livello di singola molecola e/o in colture di cellule intere. Nel caso di probes formati per coniugazione a supporti nanocristallini, inoltre, la multivalenza imposta dalla geometria della nanoparticella provoca un sostanziale aumento di affinità dei leganti generando materiali ideali per il targeting cellulare e l'imaging ad alta risoluzione di tessuti e di molecole.

Risultati attesi nell'anno

Sintesi di nanoparticelle magnetiche per l'internalizzazione in colture cellulari. Sintesi e valutazione di nuovi composti a base saccaridica attivi contro le patologie di origine batterica. Sintesi, analisi strutturale e valutazione biologica di nuovi leganti delle integrine. Scale-up della procedura sintetica per i composti di maggiore interesse. Coniugazione delle molecole attive sulla superficie di nanoparticelle metalliche. Sintesi di strutture nanoorganizzate a base di composti analoghi di porfirine per l'impiego in MRI.

Potenziale impiego

- per processi produttivi

Le nanobiotecnologie oltre ad avere una valenza scientifica hanno anche un potenziale ritorno economico. Molte indagini di mercato sottolineano la continua crescita di quest'area. Secondo una stima moderata è previsto che ognuna delle aree coinvolte nelle nanobiotecnologie cresca del 10-30% ogni anno. Per l'anno 2008 si prevede che le industrie biotecnologiche superino i 10B di \$ di vendite (dati riportati in Biotechnol. Prog. 2005, 21, 2-10).

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

In questo momento in Italia c'è grande richiesta da parte della ricerca medica, specialmente nel settore diagnostico, di competenze chimiche per la messa a punto di sistemi nanostrutturati funzionalizzati allo scopo di interferire con le funzionalità biologiche in vitro e in vivo. La costituzione di un'area specifica di ricerca in questo campo, raccogliendo esperienze pregresse ma oggi frammentate, permetterebbe di fornire risposta a questa esigenza diffusa.

Moduli

Modulo: Nanobiosensori per lo studio dei fenomeni di adesione di agenti patogeni

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Modulo: Sintesi di nanoparticelle per studi di diagnostica medica

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari

Luogo di svolgimento attività: Sede principale Istituto

Risorse commessa 2006

Pers. tempo ind/det	Funz.+ Invest.	Spese da Fonti Esterne	Spese per Infrastrutt. tecn.-scient a gestione accentrata	Totale	Risorse da esercizi precedenti	Massa Spendibile	Costi figurativi	Spese generali accentrate	Valore Effettivo
1	2	3	4	5=1+2+3+4	6	7=2+3+6	8	9	10=5+6+8+9
0	19	0	0	19	0	19	0	N.D.	19

valori in migliaia di euro



<i>Unità di personale di ruolo*</i>	
ricercatori	Totale
4	6

*equivalente tempo pieno

<i>Unità di personale non di ruolo</i>									
associato	dottorando	borsista	assegnista	specializzando	incaricato di ricerca	professore visitatore	collaboratore professionale	altro	Totale
N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.

<i>Richiesta nuove unità di personale</i>			
tempo determinato	tempo indet	non di ruolo*	Totale
0	1	2	3

*dottorati, borse di studio, assegni di ricerca