Obiettivi di ricerca del Dipartimento triennio 2015 - 2017

Come indicato nel Quadro A1, la ricerca svolta nel Dipartimento si articola in **5 ambiti** di ampio respiro e largamente interdisciplinari :

1. **Chimica supramolecolare e nanotecnologie**
2. **Chimica teorica e computazionale**
3. **Energia, ambiente e chimica sostenibile**
4. **Progettazione, sintesi e formulazione di farmaci**
5. **Sintesi, caratterizzazione e reattività di composti organici e biomolecole**

Ognuno degli ambiti di ricerca comprende numerose **linee di ricerca**. Dal momento che non tutte si possono evincere dal Quadro B.1.b (gruppi di ricerca), esse vengono elencate di seguito:

Ambito 1: Chimica supramolecolare e nanotecnologie

- Studi di nanoparticelle e delle loro applicazioni nella chimica dei materiali, in biologia e medicina.
- Sintesi, caratterizzazione e studio di sistemi discreti contenenti centri metallici e unità cromofore per applicazioni fotochimiche (fotosintesi artificiale, fotocatalisi), riconoscimento molecolare e trasporto di ioni attraverso modelli di membrana cellulare.
- Sensori Grafene.
- Recettori artificiali, materiali multifunzionali e polimeri supramolecolari di tipo Host-Guest.
- Idrogel compositi biocompatibili.
- Autoassemblaggio su superfici.
- Preparazione e funzionalizzazione di grafene, nanotubi e nanodiamanti di carbonio.
- Materia organica soffice nano-strutturata.
- Nanocellulose.
- Applicazione della nanotecnologia avanzata nello sviluppo di innovativi strumenti di diagnostica del cancro.

Ambito 2: Chimica teorica e computazionale

- Metodi teorici per il fotoassorbimento e la fotoionizzazione molecolare, sviluppo di codice e calcolo parallelo su larga scala.
- Spettroscopie computazionali per adsorbati e nanoparticelle.
- Teoria della ionizzazione molecolare e di imaging con impulsi ultracorti a campi forti.
- Metodi di risposta Coupled-Cluster e DFT per proprietà molecolari e spettroscopie computazionali. Effetti ottici lineari e non lineari anche chirali in campi magnetici intensi.
- Metodi computazionali per il design e lo screening di enzimi *in silico*.
- Metodi *course grained* per la simulazione di enzimi e proteine in condizioni operative.

Ambito 3: Energia, ambiente e chimica sostenibile

- Sintesi, caratterizzazione strutturale e funzionale di materiali e nano-materiali per la catalisi eterogenea, la fotocatalisi, le applicazioni energetiche, la chimica sostenibile e la chimica ambientale.
- Sviluppo di catalizzatori omogenei a base di metalli di transizione per processi catalitici sostenibili.
- Derivati metallo-cromoforo per applicazioni fotofisiche.
- Ossidazione catalitica di metano e VOCs.
- Composti Organici Volatili nelle valutazioni ambientali, per diagnosi cliniche e qualità della vita.
- Aerosol atmosferici e processi termici.
- Chimica analitica per i Beni Culturali.
- Sviluppo di composti di coordinazione e organometallici funzionali (per fotocatalisi, per la costruzione di sistemi supramolecolari, e per applicazioni in diagnostica e terapia).
- Valorizzazione di biomasse rinnovabili per la produzioni di composti chimici e biocarburanti.
- Sistemi integrati per il controllo dell'inquinamento marino.
- Materiali strutturati per l'isolamento termico e applicazioni marine.

Ambito 4: Progettazione, sintesi e formulazione di farmaci

- Progettazione e sintesi di peptidomimetici e inibitori della proteasi.
- Inibitori delle protein-chinasi.
- Progettazione e sintesi di inibitori isopeptidase.
- Bioconiugati della vitamina B12 come agenti chemioterapici.
- I nanotubi di carbonio come supporti neuronali.
- Nanostrutture di carbonio come sistemi di *drug delivery*.
- Nanocapsule per la somministrazione mirata di radioattività.
- Sistemi terapeutici innovativi per uso orale.
- Formulazione e caratterizzazione di sistemi solidi per il rilascio modificato di principi attivi.
- Attivazione e salificazione mecano-chimica di principi attivi poco biodisponibili.
- Processi tecnologici *solvent-free*: estrusione per fusione e *spray congealing*.
- Coniugati di nanoparticelle di oro con porfirine per la terapia fotodinamica.
- Sviluppo di porfirine e coniugati metallo-porfirinici per la terapia tumorale e *l'imaging*.
- Design e sintesi di ligandi per i recettori del sistema peptidergico.
- Progettazione, sintesi e valutazione biologica di nuovi ligandi sigma.
- Progettazione, sintesi e attivita antimicobatterica di nuove molecole.
- Receptor ligandi: gli antagonisti per i recettori adenosinici.

Ambito 5: Sintesi, caratterizzazione e reattività di composti organici e biomolecole

- Determinazione della configurazione assoluta mediante metodi computazionali.
- Sintesi di composti organici B- e N-dopati.
- Sintesi di emettitori organici innovativi.
- Studi biocristallografici ed elettrochimici di proteine redox.
- Biocristallografia di proteine artificiali e naturali.
- Peptidi artificiali per il riconoscimento di piccole molecole.
- Studi di reazioni usate per la sintesi di composti di chimica fine.
- Sintesi e valutazione in vitro e in vivo di PEG coniugati.

- Isolamento e determinazione strutturale di composti ad attività inibitoria della trombina da Basidio miceti.
- Analisi delle componenti minori in matrici alimentari.
- Sintesi di eterocicli azotati funzionalizzati mediata da enzimi enantioselettivi.
- La funzionalizzazione di gamma-lattamici attraverso reazioni ATRC (*Atom Transfer Radical Cyclization*) catalizzate da metalli.
- Sviluppo di metodi innovativi per efficiente ancoraggio di peptidi e anticorpi su supporti solidi.
- Immobilizzazione di fattori neurotrofici per lo sviluppo di nano-sistemi diagnostici di malattie neurodegenerative.
- Sintesi di lattoni chirali in forma enantiopura e valutazione della loro attività biologica.
- Sintesi di alfa-alchilden-gamma-lattoni.

Monitoraggio

Dal momento che ognuna di queste linee di ricerca può essere considerata un obiettivo del Dipartimento, verranno monitorati la numerosità dei ricercatori coinvolti, l'andamento dei finanziamenti e il numero di pubblicazioni per linea di ricerca nell'ambito del triennio.

Azioni

Nel caso in cui gli indicatori del monitoraggio nel triennio 2015-2017 mettessero in evidenza l'esaurimento della attività in una linea di ricerca, le competenze dei ricercatori coinvolti verranno convogliate, attraverso collaborazioni, su linee che possano valorizzarle.

Modalità di realizzazione degli obiettivi primari.

Nella seguente tabella accanto a ogni obiettivo primario vengono indicate le conseguenti azioni e gli indicatori per il relativo monitoraggio.

Premessa generale

Il Dipartimento dispone di fondi liberi limitati e in gran parte utilizzati e per il sostegno dell'acquisto e manutenzione della strumentazione di interesse generale. Non è al momento in grado di condurre significative azioni di tipo premiale (ad esempio, premi a giovani ricercatori particolarmente attivi, assegni di ricerca di Dipartimento,...). Le azioni proposte saranno dunque principalmente a livello di incoraggiamento, sostegno logistico e amministrativo, e di 'moral suasion'.

Obiettivo 1. Unificazione degli spazi destinati al Dipartimento	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
Premessa	<p>Il Dipartimento è attualmente diviso su due sedi principali (Ed. C11 + Ed. A/G). L'edificio A/G è completamente inadeguato e c'è una impellente necessità di laboratori attrezzati per le attività di ricerca e didattiche che comportano rischio chimico. Seppure le due sedi siano nello stesso comprensorio, questa divisione porta a difficoltà e sprechi nella gestione del Dipartimento: strumentazione comune (duplicazioni, sprechi, logistica...), problemi di sicurezza, complicazioni nella gestione dei rifiuti chimici, dispersione del personale tecnico e amministrativo, etc.</p> <p>L'Ateneo si è attivato per unificare gli spazi destinati al Dipartimento, deliberando la progressiva assegnazione dell'intero Edificio C11 al DSCF. L'Ateneo ha inoltre destinato per il 2015 una prima <i>tranche</i> di finanziamenti per attrezzare con cappe aspiranti laboratori dismessi dell'edificio C11 in previsione dell'unificazione.</p>
Azioni	Indicatori/monitoraggio
1 Attrezzare un laboratorio nell'edificio C11 per consentire lo spostamento di parte delle strumentazioni dall'edificio A al C11.	a) Date di fine dei lavori (iniziati nel 2014) che si intende siano terminati entro i primi mesi del 2015. b) Date di inizio e fine del processo di spostamento della strumentazione, che si intende completare entro il 2015.
2 La prima <i>tranche</i> di risorse finanziarie destinata dall'Ateneo sarà utilizzata per l'acquisto e installazione di numerose cappe aspiranti nell'ambito di un piano di adeguamento e riqualificazione di parte dell'Edificio C11 in modo da consentire il graduale trasferimento di tutte le attività di	a) Data di stipula del contratto di acquisto delle cappe aspiranti. b) Date di inizio e fine installazione delle cappe. c) Monitoraggio costante del processo di acquisto e installazione delle cappe aspiranti, in modo che sia completato entro

Ricerca del DSCF attualmente presenti nell'edificio A/G.	il 2015.
Obiettivo 2. Nuova strumentazione scientifica	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
Premessa	La strumentazione scientifica del Dipartimento è spesso obsoleta e inadeguata per competere a livello internazionale. Purtroppo questa situazione è aggravata, oltre che dalla generale scarsità di finanziamenti per la ricerca, dalla concomitante assenza di un piano specifico di Ateneo o Ministeriale per la strumentazione.
Azioni	Indicatori/monitoraggio
1. Strumentazione medio-piccola (5.000 – 100.000 €). Il Dipartimento si impegna a cofinanziare aggregazioni di ricercatori per richieste di finanziamenti rivolte all'acquisto di nuova strumentazione medio-piccola.	a) Numero e tipologia di nuova strumentazione medio-piccola acquisita o per la quale si è ottenuto un finanziamento. b) Numero di aggregazioni fra ricercatori finalizzate a tali acquisizioni.
2. Grande strumentazione (> 100.000 €). Il Dipartimento intende cofinanziare direttamente e sollecitare l'impegno concreto dell'Ateneo, anche in termini di cofinanziamento, per favorire l'accesso a ulteriori finanziamenti come ad esempio quelli erogati dalle Fondazioni	a) Tipologia ed entità di finanziamenti specifici ottenuti da parte dell'Ateneo o da altre fonti (e.g. EU, Fondazioni,...).
Obiettivo 3. Sostegno, promozione e rafforzamento della ricerca scientifica del DSCF e, in particolare, del suo livello internazionale.	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
Premessa	Il Dipartimento, accanto a gruppi di ricerca fortemente motivati e produttivi e in grado di attrarre finanziamenti, presenta anche ricercatori meno produttivi (seppure nessun ricercatore sia risultato inattivo secondo i criteri VQR). Spesso essi, oltre ad essere fortemente impegnati in attività didattiche, tendono ad essere poco aggregati: la frammentarietà è anche conseguenza della disgregazione di gruppi di ricerca storici dovuta ai numerosi pensionamenti degli ultimi anni e del progressivo calo dei finanziamenti ordinari per la ricerca (MIUR, Regione, Ateneo). Dunque le azioni del Dipartimento devono essere rivolte sia al sostegno dei gruppi già attivi che al 'recupero' dei ricercatori meno produttivi. Si intende cioè favorire la crescita generalizzata del livello della ricerca, anche attraverso un aumento delle sinergie e collaborazioni interne, al fine di prevenire situazioni di "inattività" dei

	ricercatori. Particolare importanza viene poi data all'internazionalizzazione della ricerca, tramite collaborazioni e scambi.
Azioni	Indicatori/monitoraggio
1. Sostegno della ricerca di eccellenza, ovvero di quei gruppi già fortemente attivi, fornendo adeguato supporto tecnico-logistico e amministrativo, oltre che la dovuta visibilità mediatica della ricerca (e.g. sul sito del DSCF).	a) Numero di pubblicazioni su riviste ad alto fattore di impatto. b) Numero di progetti finanziati. c) Numero di assegnisti e dottorandi coinvolti nei progetti.
2. Il Dipartimento intende promuovere progetti di ricerca inter-SSD, che coinvolgano le diverse competenze presenti al suo interno, al fine di favorire l'aggregazione e il reperimento di fondi per la ricerca.	a) Numero di progetti di ricerca presentati/finanziati che coinvolgano docenti di SSD diversi. b) Numero di pubblicazioni che abbiano fra gli autori docenti del Dipartimento appartenenti a diversi SSD.
3. Sostegno dei ricercatori scarsamente attivi e produttivi, favorendo e sollecitando le collaborazioni interne al fine di prevenire situazioni di "inattività".	a) Numero di ricercatori senza pubblicazioni scientifiche nel triennio. b) Numero di ricercatori che hanno ripreso la produzione scientifica. c) Andamento del numero di pubblicazioni pro-capite.
4. Sostegno delle iniziative volte all'internazionalizzazione della ricerca del Dipartimento (e.g. collaborazioni, scambi, dottorati in co-tutela,...), fornendo adeguato supporto tecnico-logistico e amministrativo, oltre che la dovuta visibilità mediatica della ricerca (e.g. sul sito del DSCF).	a) Numero di pubblicazioni su riviste con co-autori stranieri. b) Numero di progetti e iniziative internazionali presentati (ed eventualmente approvati/finanziati). c) Numero di dottorandi i co-tutela con Atenei esteri. d) Numero di dottorandi che trascorrono consistenti periodi di ricerca all'estero (almeno un mese). e) Numero di scambi di personale docente (<i>incoming/outgoing</i>).
5. Completamento della parte relativa alla ricerca nel sito web del Dipartimento.	a) Data di completamento del sito.
Obiettivo 4. Rafforzamento delle collaborazioni scientifiche interdisciplinari in Ateneo e con enti di ricerca del "Sistema Trieste" (e.g. Elettra, SISSA, Area di Ricerca..) e realtà produttive del territorio (distretti tecnologici).	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
Azioni	Indicatori/monitoraggio
1. Sviluppare e implementare le recenti convenzioni stipulate con la Sincrotrone Trieste e il CNR.	a) Numero di progetti in collaborazione. b) Numero di pubblicazioni congiunte. c) Numero di dottorandi, borsisti ed assegnisti in co-tutela fra il Dipartimento e tali Enti. d) Numero di dottorandi, borsisti ed assegnisti co-finanziati da tali Enti.
2. Sviluppare progetti di ricerca	a) Numero di progetti in collaborazione.

interdipartimentali.	<ul style="list-style-type: none"> b) Numero di pubblicazioni congiunte. c) Numero di dottorandi, borsisti ed assegnisti in co-tutela fra Dipartimenti.
3. Sviluppare progetti con distretti e realtà regionali produttive.	<ul style="list-style-type: none"> a) Numero di progetti in collaborazione. b) Numero di pubblicazioni e/o applicazioni brevettuali congiunte. c) Numero di dottorandi, borsisti ed assegnisti in co-tutela con tali realtà.