

**TABELLA 1. Obiettivi primari per il triennio 2015-2017**

<b>Obiettivo 1 Consolidare e aumentare la produzione e la qualità scientifica del Dipartimento</b>	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
<b>Azioni</b>	<b>Indicatori/monitoraggio</b>
<i>Azione 1.1</i> - Consolidare e/o aumentare il numero e la qualità di prodotti della ricerca riportati in D1.	A. Numero totale di articoli di ricerca su riviste scientifiche nazionali e internazionali. B. Numero totale di articoli pubblicati su riviste appartenenti alla fascia più alta per la comunità scientifica di riferimento (primo quartile secondo classificazione ISI, ovvero A secondo classificazione VQR). C. Numero totale di monografie (libri e Contributo in volume) pubblicate presso editori internazionali riconosciuti.
<i>Azione 1.2</i> - Consolidare la competitività delle aree di eccellenza (VQR) e rafforzare le aree deboli.	A. Verifica ex post della qualità del reclutamento effettuato: analisi della pubblicazioni di personale RTD reclutato o personale con avanzamenti di carriera (con indicatore il numero di prodotti pubblicati appartenenti al primo quintile secondo classificazione ISI, ovvero A secondo classificazione VQR).
<i>Azione 1.3</i> - Sviluppare meccanismi di valutazione interni che garantiscano il monitoraggio dei risultati dell'attività dei Corsi di dottorato.	A. Misura qualità scientifica docenti tutor attraverso una soglia minima di lavori ultimi triennio, da porsi pari a 3 prodotti ISI nell'ultimo triennio. B. Misura qualità scientifica raggiunta dal dottorando (soglia minima di pubblicazioni per accedere all'esame finale pari a 1 prodotto ISI).
<i>Azione 1.4</i> - Riduzione dei docenti senza produzione scientifica attraverso promozione di collaborazioni nel dipartimento e/o tra dipartimenti, e aumento di scambi di informazione tra i gruppi di diverse aree.	A. Numero di docenti inattivi. B. Numero di seminari dipartimentali
<i>Azione 1.5</i> - Consolidare e/o aumentare il numero degli interventi a convegni, workshop, seminari di studio, scuole.	A. Numero medio di partecipazioni attive (comunicazione orale/poster) di dottorandi e assegnisti.

<b>Obiettivo 2 Aumentare la mobilità in entrata ed uscita in modo particolare per dottorandi e assegnisti</b>	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
<b>Azioni</b>	<b>Indicatori/monitoraggio</b>
<i>Azione 2.1</i> - Aumentare la diffusione dei bandi relativi a posizioni di ricerca (dottorando, assegno di ricerca, RTD) presso il Dipartimento mediante una rete nazionale ed internazionale di Istituti di ricerca.	Numero <i> fellow</i> stranieri ed italiani (ricercatori italiani o stranieri che afferiscono ad una università o centro di ricerca non nazionale) che presentano domanda a posizioni di ricerca all'interno del Dipartimento, in relazione ai posti banditi.
<i>Azione 2.2</i> - Incentivare la mobilità internazionale in ingresso e in uscita (per seminari e/o collaborazioni di ricerca) e sostenere lo svolgimento di stage, di durata significativa, in Centri di ricerca non-nazionali di elevata qualificazione per i dottorandi.	Numero di ricercatori e dottorandi in entrata e in uscita per un periodo > 3 mesi
<i>Azione 2.3</i> - Aumentare la possibilità di accesso a bandi attraverso la diffusione di informazioni e la creazione di una struttura dipartimentale di supporto alla stesura di progetti europei e bandi per dottorandi (es.H2020-MSCA-ITN)	Numero di partecipazioni a bandi H2020-MSCA-ITN o altri bandi internazionali competitivi

<b>Obiettivo 3 Consolidare e aumentare le collaborazioni con enti pubblici e privati nazionali ed esteri per iniziative comuni nel campo della ricerca di base e delle sue applicazioni</b>	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
<b>Azioni</b>	<b>Indicatori/monitoraggio</b>
<i>Azione 3.1</i> – Ridefinizione e potenziamento del ruolo delle realtà produttive nelle varie attività di formazione e ricerca.	Numero e tipologia di iniziative organizzate per presentare il Dipartimento e per coinvolgere e dialogare con aziende e altre realtà produttive.
<i>Azione 3.2</i> - Aumentare le possibilità di collaborazioni con le attività produttive per gli studenti del Dottorato.	<ul style="list-style-type: none"> <li>a) Numero di tesi e/o tirocini per studenti della Laurea Magistrale presso enti o aziende pubbliche e private.</li> <li>b) Numero di Dottorati in Azienda;</li> <li>c) Numero di posizioni di Dottorato aggiuntive a quelle assegnate dall' Ateneo (fonte MIUR-GIOVANI, PON-POR, privati)</li> </ul>
<i>Azione 3.3</i> - Aumentare i finanziamenti da parte di aziende o enti privati, focalizzati a specifiche applicazioni della ricerca di base all'industria e ai settori produttivi in genere.	Totale finanziamenti da parte di aziende o enti privati per assegni di ricerca, RTD, borse di dottorato.

<b>Obiettivo 4 Aumentare la possibilità di accesso a fonti di finanziamento competitive nazionali e comunitarie</b>	
Monitoraggio	Riesame 2015
Scadenza obiettivo	2017
<b>Azioni</b>	<b>Indicatori/monitoraggio</b>
<i>Azione 4.1</i> - Aumentare la possibilità di accesso a progetti di Ateneo e/o nazionali (come STAR e SIR) che favoriscano la partecipazione a successivi bandi comunitari (es. H2020).	Numero di progetti presentati a bandi di Ateneo o nazionali.
<i>Azione 4.2</i> - Aumentare la possibilità di accesso a bandi comunitari.	<ul style="list-style-type: none"> <li>A. Numero di seminari e corsi di esperti bandi comunitari.</li> <li>B. Numero di partecipazioni a bandi comunitari.</li> </ul>
<i>Azione 4.3</i> - Implementare attività di supporto per la presentazione di progetti, e sostegno ai ricercatori dell'Ateneo nella gestione di progetti complessi, in cui sono coinvolti diversi partner.	A. Istituzione e attività documentate di un'unità operativa/ufficio di ricerca nel dipartimento finalizzato alla ricerca e alla segnalazione di opportunità di finanziamenti esterni e al sostegno nella stesura dei progetti.
<i>Azione 4.4</i> - Promozione di collaborazioni tra gruppi intra- e/o inter-dipartimento per la partecipazione a call che richiedano competenze trasversali.	A. Attivazione di cicli di seminari su tematiche strategiche per il Dipartimento.

## TEMATICHE DI RICERCA

Le attività di Ricerca del Dipartimento coprono vari settori della Chimica, tra i quali, la progettazione e la sintesi di nuove molecole, dalle molecole di bassa massa molecolare alle macromolecole, la purificazione e la caratterizzazione analitica di molecole di origine naturale e di sintesi, la determinazione strutturale di nuove molecole mediante diffrazione raggi X, risonanza magnetica nucleare, spettroscopie ottiche ed elettroniche di spin, spettrometria di massa, e la modellizzazione con metodi teorici e computazionali.

Gli studi di *progettazione e sintesi di nuove molecole* sono mirati alla produzione di molecole innovative con proprietà biologiche o farmacologiche, attività catalitiche in importanti processi chimici e di polimerizzazione, o alla produzione di nuovi materiali strutturali e funzionali, per applicazioni in campi anche molto diversi. Nel Dipartimento di Scienze Chimiche si trovano, in particolare, competenze uniche nel campo della catalisi di polimerizzazione, della sintesi organica, del drug design, della green chemistry e fotochimica organica nonché nel settore del design molecolare assistito dal computer. Tali competenze permettono di manipolare facilmente le caratteristiche microstrutturali delle singole macromolecole attraverso sintesi a stereo- e regio-selettività controllate, al fine di ottenere specifiche strutture molecolari e, di conseguenza, ottenere le proprietà fisiche volute dei materiali. Le attività di ricerca riguardano, ad esempio, lo studio di biomolecole e biopolimeri per applicazioni in biotecnologia (dallo sviluppo di biosensori alle applicazioni biomedicali, dal biorisanamento allo sviluppo di bioraffinerie), lo studio di molecole organiche funzionali e polimeri organici per applicazioni speciali, come la ricerca di materiali per ottica e microelettronica, e per applicazioni strutturali, come la ricerca e lo sviluppo di materiali dalle proprietà meccaniche di rigidità e flessibilità innovative e di nuovi elastomeri, e lo studio di materiali nanostrutturati per applicazioni nelle nanotecnologie in campi diversi, dalla biologia alla medicina, dalla microelettronica alla nanofotonica. Competenze uniche sono disponibili nel campo della sintesi biomimetica di biopolimeri funzionali di natura fenolica per applicazioni nei campi dell'elettronica, delle tecnologie, della chimica degli alimenti e della biomedicina.

Le ricerche nel campo della *purificazione ed analisi chimica e fisica* sono ampie e diversificate e comprendono una vastità di settori di interesse sia biomedico che alimentare e tecnologico industriale. Molto rilevante è lo sviluppo di attività legate al territorio, con riferimento all'analisi e proprietà di acque minerali, alla conservazione di beni culturali, anche mediante tecniche chimico-fisiche e di spettrometria di massa. Nel DSC negli ultimi venti anni si è sviluppata una linea di ricerca rilevante sulla struttura e sintesi di composti a base carboidratica e loro derivati. Essi giocano un ruolo rilevante nella chimica e nella biologia in quanto i carboidrati e i glicconiugati sono presenti su qualsiasi superficie cellulare, procariotica, virale ed eucariotica.

Gli studi di *caratterizzazione chimico-fisica e strutturale* di molecole e macromolecole e materiali allo stato solido e l'analisi delle proprietà meccaniche dei materiali, associati alle attività di sintesi chimica, sono condotti ai più alti livelli di specializzazione, grazie alle competenze uniche nel campo della strutturistica chimica e della diffrazione dei raggi X e degli elettroni. Questi studi permettono, ad esempio, di indagare gli aspetti connessi alla formazione e alla stabilità conformazionale ed alla cinetica di formazione di macromolecole biologiche, nonché alla loro interazione con molecole di interesse farmacologico, di comprendere le strette relazioni che intercorrono tra struttura molecolare, struttura cristallina e proprietà meccaniche di materiali polimerici ecc.. Le metodologie utilizzate vanno dalle tecniche di diffrazione ad alto e basso angolo, alle tecniche di microscopia elettronica e diffrazione elettronica, alle tecniche calorimetriche, quali la calorimetria differenziale a scansione (DSC) e la calorimetria isoterma a titolazione (ITC), alle tecniche spettroscopiche, quali l'NMR, l'EPR, il dicroismo circolare (CD), l'UV, Raman e la fluorescenza, fino alla spettrometria di massa. Particolare esperienza è stata maturata nel campo

della spettroscopia NMR riferita allo studio di proteine, carboidrati, polisaccaridi ed altre biomolecole quali i pigmenti melanici, nonché di metaboliti bioattivi tra cui fitotossine. Gli studi strutturali sono sempre associati ad una dettagliata analisi delle proprietà morfologiche e meccaniche dei materiali, allo scopo di ottenere un'interpretazione molecolare del comportamento meccanico dei materiali e di trovare le relazioni tra proprietà meccaniche, struttura molecolare, struttura cristallina e organizzazione morfologica. L'approccio molecolare nello studio delle proprietà fisiche e meccaniche dei materiali è la caratteristica peculiare, probabilmente unica nel panorama scientifico internazionale, delle attività di ricerca e delle competenze del Dipartimento.

Le attività di ricerca correlate ai vari aspetti della *modellizzazione* di avvale dei metodi tipici della Chimica Teorica e Computazionale, e rappresentano un importante punto di forza del DSC a livello interdisciplinare. Gli interessi generali riguardano la modellizzazione di sistemi e processi chimici complessi di rilevanza biologica e tecnologica. Settori specifici sono lo sviluppo e l'applicazione di tecniche quantistiche basate sulla teoria del funzionale della densità elettronica (DFT), con una particolare attenzione alla spettroscopia computazionale, l'implementazione di modelli dinamici innovativi (sia ab-initio che classici e "misti") basati sull'utilizzazione di condizioni al contorno non periodiche, la modellizzazione di sistemi periodici (chimica delle superfici, proprietà di materiali). Per lo svolgimento di queste attività, il Dipartimento dispone di notevoli risorse computazionali locali, ed è attivamente coinvolto in iniziative di gridcomputing sia locali che nazionali.

Tali obiettivi di ricerca pluriennali sono perfettamente allineati con gli obiettivi strategici di ateneo, che comprendono ampliamento delle conoscenze di base, trasferimento tecnologico, e attività di rilevanza per il territorio.

#### *Progettazione e sintesi di biomolecole*

L'attività di ricerca del gruppo DSB è rivolta allo sviluppo di nuove metodologie sintetiche per la sintesi totale di prodotti naturali e non-naturali che presentano un'attività biologica basata su fenomeni di riconoscimento molecolare. Al momento il principale obiettivo è rappresentato dallo sviluppo di metodologie sintetiche per la sintesi asimmetrica di glicomimetici, di nucleosidi analoghi e di acidi nucleici artificiali. In particolare sono in corso studi per l'individuazione e la sintesi di molecole farmacologicamente attive per il trattamento di patologie rare quali la fibrosi cistica e le malattie di Gaucher e di Pompe e la sintesi di acidi nucleici artificiali da impiegare in terapie di silenziamento genico.

#### *Struttura e sintesi di carboidrati*

Studio strutturale di glicconiugati e polisaccaridi della membrana esterna e della capsula di batteri Gram-negativi fitopatogeni, umano patogeni, simbiotici ed estremofili. Studio del ruolo svolto da queste molecole nella interazione ospite-batterio o ambiente esterno-batteri. Analisi della componente glicidica di glicoproteine virali. Studio delle interazioni carboidrati-proteine mediante Risonanza Magnetica Nucleare. Sintesi di carboidrati: produzione di nuovi protocolli in glicochimica, sintesi e modifiche di mono-, oligo- poli-saccaridi e gliconiugati a potenziale attività immunomodulante o come vaccini. Impiego di carboidrati naturali o chimicamente modificati nella tecnica conciararia.

#### *Sostanze Naturali Bioattive*

Isolamento e caratterizzazione chimica di metaboliti secondari bioattivi prodotti da funghi e batteri fitopatogeni e da piante, utilizzando tecniche cromatografiche, spettroscopiche e ottiche avanzate al fine di individuare metodi eco-compatibili alternativi o integrativi ai comuni metodi di difesa delle colture agrarie e forestali. Alcuni di questi metaboliti hanno mostrato potenziale applicazione in

medicina come antitumorali. I metaboliti bioattivi sono utilizzati per condurre studi di correlazione struttura-attività e sul loro meccanismo d'azione.

#### *Biotecnologie Cellulari*

Aggregazione proteica e malattie conformazionali: il caso di ApoA\_I. Cross-linking proteina-proteina indotto da irradiazioni laser-UV di cellule vitali: strategia innovativa per identificare interazioni transienti in vivo. Ruolo funzionale dell'angiogenina nel recupero da stress cellulare nelle amiloidosi. Agenti anti-ossidanti e anti-stress cellulare da fonti naturali. Analisi delle interazioni di proteine con membrane biomimetiche mediante Raman Tweezers. Peptidi umani dotati di attività antimicrobica. Funzionalizzazione di nanotubi di carbonio con Apolipoproteina A-I.

#### *Fisica dei Polimeri e Chimica Macromolecolare*

Il Gruppo di Fisica dei Polimeri del Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Napoli "Federico II" svolge ricerche in vari settori della chimica dei polimeri tra cui la sintesi e la caratterizzazione chimico-fisica e meccanica di materiali polimerici, in particolare di poliolefine e copolimeri di olefine, e di compositi a matrice polimerica. Il Gruppo possiede competenze nei settori della sintesi di poliolefine stereoregolari mediante catalisi metallorganica e dello studio strutturale di polimeri cristallini. E' il gruppo leader a livello internazionale nello studio strutturale di polimeri semicristallini. Gli studi strutturali sono condotti ai più alti livelli di specializzazione utilizzando tutte le tecniche di caratterizzazione dello stato solido di materiali, dalla diffrazione dei raggi X ad alto e basso angolo, alla microscopia elettronica, alla risonanza magnetica.

Gli argomenti delle principali attività di ricerca sono:

- 1) Sintesi e caratterizzazione chimico-fisica di nuovi materiali polimerici mediante catalizzatori metallorganici.
- 2) Studio della struttura cristallina e della morfologia di polimeri mediante diffrazione dei raggi X ad alto (WAXS) e basso angolo (SAXS), microscopia elettronica in trasmissione (TEM), diffrazione degli elettroni e NMR per lo stato solido.
- 3) Studio delle relazioni tra la struttura molecolare e cristallina di materiali polimerici, le loro proprietà fisiche e meccaniche e la struttura dei catalizzatori utilizzati per la preparazione dei polimeri (material retro-design through catalyst design).
- 4) Studio della cristallizzazione di polimeri in condizioni quiescenti e in presenza di flusso esterno mediante tecniche di diffrazione dei raggi X ad alto e basso angolo (WAXS e SAXS) e scattering dei neutroni al basso angolo (SANS).
- 5) Studio di elastomeri innovativi e di gomme in uso per pneumatici.
- 6) Studio di nanostrutture da materiali polimerici (copolimeri a blocchi) per applicazioni in microelettronica, optoelettronica, sensoristica ambientale e per biosensori.
- 7) Nanopatterning di superfici di film sottili polimerici.
- 8) Nanocompositi polimerici con nanoparticelle funzionalizzate di metalli e ossidi metallici.
- 9) Studio di geli polimerici per applicazioni come "smartmaterials" in campo biomedico (ad esempio per rilascio controllato di farmaci).
- 10) Materiali polimerici innovativi per packaging alimentare flessibile e rigido.

#### *Processi, Prodotti e Impianti Industriali Chimici*

Il gruppo PPICI svolge un'intensa attività di ricerca nei settori della Chimica Industriale e degli Impianti Chimici industriali. Tale attività fa particolare riferimento, da un lato, all'utilizzo di materia prima rinnovabile o di scarto per la produzione di biocarburanti, prodotti chimici, materiali, e dall'altro, alla conduzione di processi di combustione/gassificazione finalizzati alla produzione di energia (e ai relativi sistemi di sequestro della CO<sub>2</sub>), e alle possibilità di reimpiego di residui solidi di differente natura.

L'attività di ricerca si basa su ampie competenze in catalisi, proprietà e caratterizzazione dei materiali, cinetica chimica, reattoristica, fenomeni di trasporto ed analisi modellistica.

#### *Sintesi caratterizzazione e fotochimica*

Le attività di ricerca del gruppo SCF sono indirizzate allo sviluppo di nuove metodologie sintetiche, principalmente fotochimiche, per la preparazione di molecole bioattive quali C-glicosidi e lignani. Oltre alle sintesi, composti bioattivi (a potenziale attività allelopatica) vengono isolati e caratterizzati da fonti vegetali. Inoltre, vengono analizzati i processi di trasformazione di xenobiotici nell'ambiente con particolare riferimento alle trasformazioni indotte dalla luce. Le indagini richiedono un ampio uso di tecniche di separazione e caratterizzazione spettroscopica e in alcuni casi di calcoli computazionali.

#### *Artificial Metallo-Enzymes*

Sviluppo di "attrezzi molecolari", capaci di limitare le libertà conformazionali di peptidi. *Drug design*: sviluppo di inibitori della motilità cellulare, sintesi e caratterizzazione di proteine naturali per applicazioni terapeutiche.

Chimica bioinorganica. Sviluppo di metallo-proteine artificiali: modelli di eme-proteine; modelli di proteine ferro-ossigeno; 3) modelli di proteine contenenti siti di legame mononucleare. Caratterizzazione strutturale e funzionale.

Immobilizzazione di proteina su superfici: sviluppo di biosensori e biocatalizzatori per applicazioni in diagnostica.

#### *Ricerca Ambiente e Salute*

Le tematiche di ricerca del gruppo RAS si sviluppano in più percorsi concepiti per affrontare problematiche centrali, rivolte alla progettazione e alla sintesi di nuove molecole con spiccate attività farmacologiche, in relazione a patologie virali (HIV, HCV), tumorali e neurodegenerative, oltre che all'analisi chimica e alla catalogazione di prodotti di interesse nutrizionale e cosmetico. I punti focali delle attività di ricerca svolte nei nostri laboratori sono rivolti sempre alla giusta coniugazione della validità scientifica delle linee seguite con l'attività didattica formativa di studenti dei corsi di laurea in Scienze Chimiche, Scienze Biotecnologiche e Scienze Biologiche, nonché di dottorandi della scuola di dottorato in Scienze Chimiche.

#### *Chimica e Tecnologie per l'Ambiente*

- Studio dei processi di formazione dei sottoprodotti della disinfezione (*DBPs*) nelle acque con particolare riguardo al monitoraggio e allo sviluppo di modelli previsionali per la formazione dei trialometani (THM).
- Caratterizzazione di matrici ambientali (suolo) e studio dei processi di bonifica *in situ*.
- Caratterizzazione di matrici ambientali (aria) e studio dei meccanismi di trasporto degli inquinanti.
- Caratterizzazione di materiali dei *Beni Culturali*.

#### *Biotecnologie Industriali, Molecolari ed Ambientali*

Produzione e caratterizzazione di enzimi (lipasi, laccasi e perossidasi) e loro applicazioni in processi industriali: i) industria chimica e sintesi di coloranti, ii) biorisanamento di acque di scarico industriali e agro-industriali e di reflui inquinati da distruttori endocrini, iii) trattamento di biomasse per lo sviluppo di bioraffinerie. Sviluppo di sistemi microbici per la produzione di bioplastiche (poliidrossialcanoati). Sviluppo di nuovi biocatalizzatori ottimizzati per la valorizzazione di scarti lignocellulosici e biomasse lignocellulosiche coltivate su terreni marginali e per la produzione sostenibile di antiossidanti per l'industria cosmetica, mediante identificazione da nuovi microrganismi, metagenomica ed evoluzione guidata. Sviluppo di sistemi di espressione di proteine ricombinanti in batteri adattati al freddo e ricerca di molecole bioattive da batteri polari.

Produzione e caratterizzazione di proteine fungine auto assemblanti e loro applicazioni nelle nanotecnologie e per la biofunzionalizzazione di superfici. Risposta adattativa a stress da alchilazione in batteri: aspetti molecolari e identificazione delle proteine coinvolte. Identificazione qualitativa e quantitativa dell'alchilazione del DNA in batteri in differenti condizioni di stress. Proteomica funzionale e differenziale nella delucidazione di meccanismi cellulari, proteomica quantitativa, sviluppo di metodiche di spettrometria di massa per l'analisi di modifiche post-traduzionali di proteine e per la diagnostica nel campo dei beni culturali. Metodologie di spettrometria di massa per l'analisi conformazionale di proteine e complessi proteici.

#### *Chimica e tecnologie di sintesi*

Il gruppo si occupa della sintesi di piccole molecole organiche polifunzionalizzate, contenenti alfa- e beta-amminoacidi ciclici e lineari o eterocicli azotati, allo scopo di ottenere composti con specifica attività biologica. In particolare viene sviluppata la sintesi di peptidomimetici contenenti analoghi di amminoacidi naturali, allo scopo di individuare nuove strutture bioattive che portino selettivamente a farmaci citotossici, inibitori enzimatici o mezzi diagnostici per cellule tumorali. L'attività biologica dei prodotti sintetizzati viene valutata in collaborazione con gruppi di ricerca che hanno una riconosciuta esperienza negli specifici ambiti. Particolare interesse è rivolto allo studio di nuove strategie di sintesi stereoselettiva e più di recente alla organocatalisi.

#### *Materiali funzionali per applicazioni avanzate*

L'attività del gruppo è incentrata sulla progettazione e la sintesi di nuovi materiali per applicazioni nell'ambito della fotonica e dell'elettronica organica. In particolare, l'attenzione è rivolta a strutture coniugate che costituiscono il materiale attivo di potenziali dispositivi elettronici/fotonici. Tra queste è possibile individuare :

- Cromofori organici e metallo-organici con proprietà liquido-cristalline
- Cromofori organici e metallo-organici e polimeri derivati per applicazioni in ottica non lineare del secondo ordine;
- Cromofori ad alto coefficiente di assorbimento per applicazioni nell'ambito delle celle solari a coloranti (celle di Graetzel);
- Polimeri coniugati a bassa bandgap, ottenuti attraverso reazioni di accoppiamento carbonio-carbonio, per applicazioni nell'ambito delle celle solari organiche a eterogiunzione e dei transistor a effetto di campo;
- Cromofori organici e metallo-organici fotoluminescenti innestati in polimeri attraverso legami di coordinazione per applicazioni nella tecnologia OLED.
- Sistemi fotoreticolabili, contenenti specie ad elevato indice di rifrazione, per la realizzazione di reticoli olografici;
- Crystal engineering di strutture acentriche e polari per applicazioni in fotonica (generazione di seconda armonica) ed elettronica (sensori piezoelettrici).

I materiali sintetizzati sono soggetti ad un'accurata caratterizzazione chimico-fisica (analisi NMR, calorimetria, ottica), strutturale (analisi di diffrazione di raggi X da cristallo singolo e da polveri) e morfologica (microscopia ottica in luce polarizzata, AFM e SEM). Tali materiali, processati in forma di film sottili attraverso la tecnica dello spin-coating o del bar-coating, vengono utilizzati e caratterizzati come strati attivi in dispositivi reali grazie alla collaborazione con enti esterni.

### *Chimica Fisica dei Nanosistemi*

Il gruppo di Chimica Fisica dei Nanosistemi ha in questi anni sviluppato competenze nel settore della Soft Matter. In dettaglio, l'attività di ricerca è incentrata sulla formulazione e caratterizzazione di aggregati anfifilici, quali micelle e liposomi, di gels e, più di recente, sul design, sintesi e formulazione di nanoparticelle ibride organico-inorganico per applicazioni nel settore biomedico e farmacologico. Dal punto di vista della caratterizzazione chimico fisica, le competenze del gruppo riguardano le tecniche di scattering di luce (DLS e SLS), raggi X (SAXS) e neutroni (SANS e NR), e tecniche di spettroscopia di risonanza (EPR e NMR).

### *First-principles Modelling of Molecules and Materials (FPM3)*

- a) Calcolo teorico di proprietà strutturali e spettroscopiche di molecole organiche e di biomolecole
- b) Modellizzazione ab initio di meccanismi di reazioni organiche ed enzimatiche
- c) Proprietà elettroniche e strutturali di materiali nanostrutturati per la conversione di energia
- (d) Studio teorico delle interfacce in materiali ibridi organico-inorganici per applicazioni fotovoltaiche

### *Theoretical and Computational Chemistry Craft@Unina*

Sviluppo di modelli originali basati sulla dinamica molecolare *ab-initio di stato fondamentale ed eccitato* per lo studio della fotoreattività e la fotofisica di sistemi complessi (proteine fluorescenti, mimi per la fotosintesi artificiale). Sviluppo di modelli originali basati sulla teoria del funzionale della densità e sulla meccanica statistica per la simulazione ed interpretazione di spettri risolti nel tempo (UV, fluorescenza, IR, Raman) e della dinamica di solvatazione per il riconoscimento molecolare in applicazioni biotecnologiche.

### *Sviluppo di sistemi mimetici di metaboliti organici*

1) Sintesi, caratterizzazione e applicazioni di oligonucleotidi modificati in strategie antisense o antigene o come aptameri. Studi su conformazioni inusuali del DNA (triplex, G-quadruplex, i-motif) e identificazione di ligandi specifici; 2) Sintesi di nuovi analoghi nucleosidici come potenziali antitumorali e/o antivirali; 3) Sintesi e caratterizzazione di glico-coniugati, mimici di oligosaccaridi ciclici e peptidomimetici; 4) Uso di osso-specie di metalli di transizione nella sintesi stereoselettiva di politetraidrofurani e spirochetali complessi; 5) Sintesi e caratterizzazione di complessi di Ru(III) a base nucleolipidica in strategie anticancro.

### *Coordinazione ed equilibri in chimica analitica*

- 1) Studio della chimica in soluzione di molecole organiche naturali e sintetiche (basi di Schiff, composti eterociclici, peptidi, ecc.) in mezzi acquosi e misti;
- 2) Speciazione di ioni metallici in sistemi metallo-legante
- 3) Studio dei processi di adsorbimento su solidi naturali e sintetici di specie chimiche di interesse ambientale e biologico.

### *Polimerizzazioni stereoselettive*

Il Laboratorio di Polimerizzazione Stereoselettiva (LSP), guidato dal Prof. Vincenzo Busico, è specializzato nello studio delle polimerizzazioni selettive di monomeri olefinici mediate da sistemi catalitici organometallici, sia molecolari che eterogenei. L'attività di ricerca include progetti fondamentali, pre-competitivi (principalmente in collaborazione con il Dutch Polymer Institute, DPI) ed applicati (in partnership bilaterali con aziende industriali).

Dal punto di vista metodologico, il gruppo si caratterizza per l'uso di strumenti di High Throughput Experimentation (HTE) e Computation (HTC) a livello di stato dell'arte. Due grandi piattaforme robotizzate per indagini cinetiche parallele in reattori miniaturizzati, una delle quali opera in uno

spin-off accademico (HTEExplore) gemmato da LSP, sono in grado di assicurare condizioni rappresentative dell'utilizzo industriale. Esse sono integrate con le necessarie strumentazioni analitiche (NMR, GPC, CEF) per lo studio microstrutturale dei polimeri, anch'esse con caratteristiche di High-Throughput, e con strumenti di modellazione computazionale per l'identificazione ex-post e predittiva di relazioni proprietà-struttura.

Le principali linee di ricerca possono essere così identificate:

- Studi fondamentali e applicati di catalizzatori organometallici molecolari (a struttura metallocenica e 'post-metallocenica') e di sistemi catalitici eterogenei del tipo Ziegler-Natta
- Caratterizzazioni microstrutturali  $^{13}\text{C}$  NMR ad alto campo di omopolimeri e copolimeri di olefine
- Indagini cinetiche molecolari su reazioni di polimerizzazione, finalizzate alla determinazione quantitativa della concentrazione delle specie catalitiche, e delle costanti cinetiche relative e - quando possibile - assolute per i processi elementari di iniziazione, propagazione, trasferimento e terminazione di catena
- Modellazioni quantomeccaniche ex-post e predittive di catalizzatori organometallici molecolari ed eterogenei
- Nuovi catalizzatori organometallici per polimerizzazioni viventi/controllate di monomeri olefinici, e nuovi copolimeri a blocchi
- Sviluppo ed applicazione di metodologie HTE/HTC integrate per la scoperta e/o lo screening di catalizzatori organometallici

#### *Chimica Organometallica*

L'attività del gruppo di chimica organometallica è incentrata sulla catalisi omogenea, in condizioni sia tradizionali sia innovative, nei seguenti ambiti:

##### *a) Design di leganti chirali basati su carboidrati.*

Questa azione si ispira al ruolo centrale della catalisi asimmetrica per la realizzazione di processi enantioselettivi convenienti, e mira alla progettazione di nuovi leganti chirali derivati da carboidrati comuni, quali glucosio e mannosio. L'elevata modularità degli zuccheri, unita alla loro versatilità sintetica e funzionale, consente di preparare catalizzatori chirali altamente modulari, capaci quindi di promuovere reazioni enantioselettive, sia in condizioni tradizionali sia nelle condizioni innovative proprie della catalisi bifasica e 'omogenea supportata'.

##### *b) Design di catalizzatori per la conversione di biomasse.*

Questa azione mira a preparare catalizzatori efficaci per la conversione di oli vegetali e loro derivati in biocarburanti e sintoni per l'industria chimica.

L'attività recente è incentrata sulla progettazione di catalizzatori a base di metalli di transizione adatti alla *trans*-esterificazione/esterificazione e all'ossidazione di doppi legami, tali da:

- produrre su larga scala con semplici passaggi sintetici;
- presentare elevata attività catalitica;
- favorire la separazione dai prodotti e l'immediato riciclo della fase catalitica.

#### *Prodotti e sistemi funzionali biomimetici e bioispirati (BIP)*

Progettazione, sintesi e proprietà di composti fenolici e polifenolici bioispirati per la realizzazione di sistemi di rilevanza tecnologica e biomedica; sintesi e relazioni struttura-proprietà-funzione di melanine e polimeri biomimetici relazionati, quali polidopamina, per lo sviluppo di

materiali innovativi biocompatibili e multifunzionali per l'elettronica organica e la bioelettronica; chimica di molecole e sistemi fotosensibilizzanti e fotoprotettivi di interesse biomedico; chimica delle sostanze organiche di interesse alimentare; basi chimiche del danno cellulare da stress ossidativo e meccanismi di controllo mediante composti ad attività antiossidante ed antinitrosante.

#### *PROcessi MAteriali e DIspositivi per Elettronica e Bioelettronica*

Promadieb riunisce competenze multidisciplinari (dalla biomedicina alla ingegneria) di rilievo per la progettazione e lo sviluppo di nuovi materiali organici per applicazioni di bioelettronica. Le principali attività si collocano in una rete a più centri (École Polytechnique de Montréal, São Paulo State University, Imperial College London, Stanford University, University of Washington) e riguardano principalmente lo sviluppo di processi innovativi in fase solida (solvent free) per trasformazioni ossidative, la funzionalizzazione di sistemi aromatici in situ nei dispositivi elettronici, la preparazione di substrati per culture cellulari.

#### *Biostrutture*

Il laboratorio biostrutture usa una vasta gamma di tecniche biochimiche, biofisiche e di modellazione con particolare accento sulla cristallografia a raggi X, microscopia Raman e dinamica molecolare per caratterizzare la struttura, la stabilità e la dinamica di macromolecole biologiche e loro complessi con diversi ligandi. I temi di ricerca includono la determinazione delle basi molecolari della proteina-proteina e il riconoscimento di acido nucleico proteine, e dei determinanti strutturali di adattamento in ambienti estremofili. Oltre ai meccanismi fondamentali, è interessato anche allo sviluppo razionale di nuovi farmaci e nella caratterizzazione della struttura e reattività di complessi proteina-nanoparticelle, nonché ad applicazioni multidisciplinari della microscopia Raman.

#### *Chimica fisica biologica e biocalorimetria*

L'attività principale del gruppo di ricerca è svolta nel campo della caratterizzazione chimico-fisica di macromolecole biologiche, (proteine e acidi nucleici) nonché di modelli di membrane biologiche e delle loro interazioni con piccole molecole. Le ricerche sono condotte sperimentalmente mediante l'uso di tecniche micro-calorimetriche (calorimetria differenziale a scansione, DSC e calorimetria di titolazione isoterma, ITC) e spettroscopiche (dicroismo circolare, spettroscopia UV/vis e fluorescenza).

#### *Biologia Strutturale*

Studio della relazione struttura/funzione di proteine: progettazione e preparazione di mutanti, mediante tecniche di biologia molecolare e di biochimica, loro caratterizzazione strutturale mediante tecniche biofisiche, in particolare 3D-NMR. Tra le molecole biologiche attualmente in esame vi sono: 1) derivati di RNasi di tipo pancreatico, con interessanti proprietà citotossiche, collegate al processo di oligomerizzazione mediante 3D domain swapping; 2) peptide  $\beta$ -amiloide (responsabile dell'Alzheimer) e suoi analoghi; 3) derivati monellina e suoi derivati, proteine dolci di potenziale interesse per l'impiego nelle diete come sostituti dei dolcificanti tradizionali

#### *Biotecnologie Biochimiche ed Enzimologia (BBE)*

Purificazione ed immobilizzazione di transglutaminasi di origine microbica; analisi della loro capacità di modificare proteine di origine animale e vegetale, dando origine ad omo- ed eteropolimeri proteici lineari o ramificati, allo scopo di poter modulare le loro attività biologiche e le proprietà di "bioplastiche" contenenti proteine o miscele di proteine e polisaccaridi. Produzione e caratterizzazione di films edibili idrocolloidali: identificazione di proteine e polisaccaridi derivanti da prodotti alimentari di scarto da utilizzare nella produzione di films edibili

per possibili applicazioni in campo alimentare. Caratterizzazione dei films per resistenza meccanica e capacità di agire da barriera al vapore acqueo e ai gas.

#### *Chimica degli amminoacidi*

Manipolazione sintetica degli amminoacidi proteinogenici finalizzata alla preparazione di amminoacidi non naturali. Preparazione di nuovi sintoni chirali protetti. Sintesi di amminoacidi contenenti zolfo e selenio. Processi di tioalchilazioni in trasferimento di fase e mediate da cesio carbonato. Nuove proline funzionalizzate al C4. Analoghi della cistationina e della omocisteina. Mimetici della lantionina. Sintesi e proprietà di peptidomimetici risultanti dalla incorporazione di amminoacidi non naturali in peptidi bioattivi.

#### *Chimica analitica per la vita*

Tecniche di estrazione solido-liquido: macerazione, percolazione, Soxhlet, Naviglio Estrattore. Produzione e controllo di qualità di bevande alcoliche e integratori alimentari.

Estrazione degli stevioglicosidi dalle foglie di stevia. Analisi di oli e grassi alimentari (burro, strutto, olio etc.): trigliceridi, acidi grassi, cere, steroli e esteri degli steroli.