



Richiesta per borsa di studio da attivare ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021

Il sottoscritto Pierluca Galloni qualifica (ricercatore/associato/ordinario) associato afferente al Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Interno 4380 email galloni@scienze.uniroma2.it

CHIEDE

L'attivazione di una borsa di studio di dottorato ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021. A tal fine comunica quanto segue:

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo: Scienze Chimiche Area per la quale si presenta la richiesta (selezionare solo una delle due):

Innovazione

Green

Tipologia di cofinanziamento (pari ad euro 8000 una tantum):

Nome dell'Ente finanziatore pubblico o privato: _____

Persona di Riferimento: _____ Telefono _____

Email _____

Fondi di ricerca dipartimentali

Progetto di Ricerca (massimo 10.000 battute complessive spazi inclusi) che comprenda

Descrizione del Progetto: Ottimizzazione e scale-up di processi catalitici e fotocatalitici sostenibili.

Lo sviluppo di nuovi sistemi catalitici per sintesi industriali a basso impatto ambientale è uno dei principali obiettivi della chimica moderna e, in particolare, della *green chemistry*. Infatti, la sintesi di molecole di interesse farmaceutico e tecnologico è sempre stata focalizzata sull'importanza intrinseca del prodotto e, fino allo scorso decennio, le problematiche connesse al processo sintetico non erano considerate. In particolare, le sintesi industriali classiche portano spesso alla produzione di un elevato quantitativo di scarti per kg di prodotto ottenuto. Questo è dovuto all'eccessivo utilizzo di solventi organici, solitamente accompagnato all'impiego di reagenti o catalizzatori tossici e dannosi sia per l'ambiente che per la salute dell'uomo. Al contrario, negli ultimi anni sta crescendo sensibilmente l'attenzione della comunità scientifica verso un approccio sostenibile alla chimica e, più in particolare, alla chimica industriale, per cui diventa fondamentale analizzare un prodotto nella sua interezza, valutando anche l'impatto ambientale connesso al suo processo produttivo. A tal proposito, la sintesi di molecole ad elevato valore aggiunto tramite processi eco-compatibili è una tematica che riceve l'interesse di numerosi gruppi di ricerca, e rientra anche tra gli obiettivi della *green chemistry*, la quale inserisce la prevenzione alla generazione di rifiuti e l'*atom economy* dei processi tra i suoi principi fondamentali.

In questo progetto di dottorato di ricerca si vogliono mettere a punto nuovi processi catalitici e fotocatalitici *eco-friendly* per la sintesi di molecole di interesse industriale, farmaceutico e tecnologico oltre che utili *building blocks* per la sintesi di prodotti ad alto valore aggiunto. In particolare, saranno ottimizzati



processi di ossidazione di vari substrati organici, come solfuri, alcheni, alcoli e ammine, e processi di ossi-bromurazione di molecole aromatiche e composti insaturi.

L'ottimizzazione dei processi prevede uno screening di vari catalizzatori, sia organici che a base di metalli; l'attenzione sarà posta sulla bio- ed eco-compatibilità del catalizzatore in modo da minimizzare il suo impatto sull'intero processo. Saranno utilizzati, inoltre, reagenti non pericolosi, inquinanti o tossici e solventi *green* in alternativa ai comuni solventi organici molecolari. Tra le varie possibilità, sarà preferito l'utilizzo di Deep-Eutectic Solvents (DESS), i cui componenti sono di origine naturale. Saranno valutati riciclo e riutilizzo dei vari componenti del sistema di reazione, in modo da abbassare significativamente l'impatto del processo in esame. Analogamente, saranno considerate fonti di energia alternative al calore per l'attivazione delle reazioni (irradiazione da microonde o ultrasuoni). Per ogni processo realizzato sarà valutato quantitativamente l'impatto ambientale tramite il calcolo del fattore E (environmental factor (E) = kg scarto/kg prodotto). I processi saranno ottimizzati su scala da laboratorio e successivamente sarà valutata la scalabilità del sistema.

I prodotti ottenuti, quali solfossidi, epossidi, dioli, aldeidi, chetoni e derivati bromurati, sono di elevato interesse in ambito farmaceutico e industriale, essendo comunemente impiegati come principi attivi in numerosi settori, come in cosmesi, nelle formulazioni di vernici, collanti, e come additivi e nelle formulazioni di farmaci.

Obiettivi formativi: L'obiettivo del progetto è quello di formare, tramite un percorso di tre anni, la figura di un ricercatore esperto e qualificato nell'ambito della chimica organica sostenibile. In particolare, saranno acquisite le conoscenze necessarie per sviluppare nuovi processi catalitici e fotocatalitici per la sintesi di molecole di interesse biologico o industriale, utilizzando metodi innovativi a basso impatto ambientale. L'attività di ricerca accademica sarà alternata a periodi di ricerca e formazione presso l'azienda BT-InnoVaChem srl, per applicare le conoscenze acquisite; inoltre, sono previsti periodi di ricerca presso laboratori all'estero all'avanguardia, esperti in catalisi. Il percorso fornirà una preparazione idonea sia per l'inserimento della figura all'interno di un'azienda chimica o farmaceutica, nel settore dell'ottimizzazione dei processi produttivi, che nel mondo accademico, per continuare l'attività di ricerca intrapresa.

Attività previste: Il progetto prevede attività di ricerca in laboratorio di Chimica Organica per lo studio e lo sviluppo di reazioni catalitiche e fotocatalitiche sostenibili. In una prima fase sarà effettuato uno screening di opportuni catalizzatori e di solventi innovativi, utilizzando l'ossidazione di solfuri come reazione modello. Seguirà l'ottimizzazione degli altri processi di ossidazione e ossi-bromurazione. L'andamento delle reazioni sarà seguito tramite le tecniche analitiche comunemente utilizzate in un laboratorio di chimica organica, come NMR, gas-cromatografia, cromatografia liquida ad alta pressione e spettrometria di massa. Per effettuare la caratterizzazione e quantificazione dei prodotti sarà disponibile la strumentazione presente presso i laboratori di chimica organica del dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, oltre che alcuni strumenti messi a disposizione dal Dipartimento stesso.

I parametri ottimizzati saranno utilizzati per effettuare uno scale-up dei processi, in vista di applicazioni a livello industriale. Lo studio delle condizioni di scale-up sarà effettuato presso BT-InnoVaChem srl, spin-off dell'Università degli Studi di Roma Tor Vergata, il quale è dotato della strumentazione necessaria per eseguire reazioni su scala semi-industriale (per la sintesi di circa 10-20 kg di prodotto).

Il percorso di Dottorato prevede anche la partecipazione a Convegni Nazionali e Internazionali, in cui il candidato avrà la possibilità di presentare il suo lavoro tramite comunicazioni orali e poster, e in cui avrà l'opportunità di confrontarsi con altri ricercatori esperti nella stessa area di ricerca.



Attinenza del progetto all'area indicata: Il progetto si inserisce nella Green Chemistry-Chimica Sostenibile, con massima attinenza alla tematica *Green*. In particolare, la messa a punto di reazioni catalitiche piuttosto che stechiometriche, l'utilizzo di quantità limitate (o nulle) di solventi organici e l'attivazione delle reazioni tramite fonti di energia alternative al calore, sono caratteristiche che rientrano tra i 12 principi della *green chemistry*, sviluppati da Anastas e Warner negli anni '90.

Risultati attesi: il progetto prevede l'ottimizzazione su scala di laboratorio di nuove sintesi innovative dei composti identificati. Dopo aver ottimizzato il processo su piccola scala si procederà ad effettuare uno scale-up su livello semi-industriale grazie alla collaborazione con l'azienda BT-InnoVaChem srl, esperta in questo settore. I risultati ottenuti saranno di interesse sia accademico che industriale, in quanto la riduzione dell'impatto ambientale dei processi su larga scala è una tematica di particolare rilievo, soprattutto in vista degli obiettivi previsti dall'Agenda 2030 per lo Sviluppo Sostenibile. I risultati più interessanti saranno divulgati tramite pubblicazioni su riviste internazionali e interventi a conferenze nazionali ed internazionali. Le soluzioni più innovative dal punto di vista applicativo saranno oggetto di brevetto, per tutelare la proprietà intellettuale dei processi sviluppati.

Azienda pubblica o privata coinvolta nazionale o straniera in cui si prevede di far svolgere il periodo obbligatorio da 6 a 12 mesi previsto dal Decreto Ministeriale: Per sviluppare i processi a livello semi-industriale sarà coinvolta nel progetto di questo dottorato la società BT-InnoVaChem srl, (www.bt-innovachem.com, contatto Dr.ssa Federica Sabuzi f.sabuzi@bt-innovachem.com). BT-InnoVaChem srl è uno spin-off accademico che si occupa dello sviluppo di sintesi industriali attraverso processi ecocompatibili di molecole di interesse biomedicale e farmaceutico. La società ha sede operativa presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche dell'Università di Roma Tor Vergata ed è dotata della strumentazione utile per effettuare reazioni catalitiche su scala semi-industriale, in modo da permettere il raggiungimento degli obiettivi previsti dal progetto. La presenza dell'azienda all'interno del Dipartimento presso cui si svolgerà l'attività sperimentale del Dottorando rende ancora più efficace l'interazione con il tutor aziendale, oltre che lo scambio di risultati, permettendo di ottimizzare il trasferimento tecnologico dal laboratorio di ricerca alla realtà produttiva.

Firma