



## **Relazione annuale della ricerca 2018**

### **1) OBIETTIVI DELLA RICERCA DIPARTIMENTALE 2018**

Il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche (DSTC) è il Dipartimento di riferimento di tutta l'area chimica dell'Ateneo. In accordo con Missione e Visione dell'Ateneo, le linee di ricerca sono focalizzate su applicazioni chimiche nell'ambito dello sviluppo sostenibile declinato nella sua più ampia accezione. La missione del DSTC è quella di contribuire all'educazione e formazione delle persone, alla ricerca e all'innovazione tecnologica necessarie a realizzare uno sviluppo sostenibile in coerenza con gli obiettivi definiti dall'ONU. Per attuare tale ambizioso obiettivo, il DSTC è impegnato nella ricerca e nella didattica di eccellenza e promuove relazioni con il settore privato, le istituzioni pubbliche e il mondo del non-profit.

Le linee guida fondamentali delle ricerche mirano allo sviluppo di una società sostenibile affrontando, attraverso ricerche multidisciplinari, le sfide del XXI secolo e, in particolare, l'accesso a fonti di energia rinnovabili e sostenibili, la conservazione e protezione dell'ambiente e del patrimonio culturale e lo sviluppo di nuove molecole, processi e tecnologie tali da garantire qualità di vita adeguata a una popolazione con prospettive di vita media sempre più lunga.

La ricerca nel DSTC si pone come obiettivi il consolidamento delle aree di eccellenza già presenti e il raggiungimento di un analogo livello per le altre aree attraverso un programma di sviluppo multidisciplinare che, a partire da studi di carattere fondamentale, si inserisca a pieno titolo nell'Agenda 2030 delle Nazioni Unite.

La strategia individuata vuole portare il DSTC ad essere punto di riferimento per la diffusione della cultura chimica sostenibile a livello nazionale e internazionale, promuovendo tutte le sue attività istituzionali: ricerca, alta formazione e terza missione.

Nell'ambito dell'obiettivo strategico R1 della Ricerca di Ateneo (potenziamento della ricerca di base e incremento della ricerca applicata), gli obiettivi principali e relativi possibili indicatori del DSTC si possono così riassumere:

- R1.1 Favorire collaborazioni interne su temi di ricerca comuni con particolare attenzione al coinvolgimento dei giovani ricercatori (n. lavori con autori di diversi gruppi di ricerca, n. lavori con un giovane ricercatore autore di riferimento)
- R1.2 Creare infrastrutture laboratoriali che possano svolgere attività di servizio per la comunità scientifica accademica e industriale e per il territorio.

Per quel che attiene l'obiettivo R2 dell'Ateneo (internazionalizzazione della ricerca) i principali obiettivi sono:

- R2.1 Il numero di pubblicazioni con coautori stranieri.
- R2.2 La partecipazione a conferenze o congressi internazionali.
- R2.3 Il rafforzamento della didattica dottorale con cicli di lezioni e seminari tenuti da scienziati stranieri di chiara fama.

Le principali linee di ricerca del DSTC sono rappresentate da attività integrate in modo da contribuire ai seguenti Obiettivi per lo Sviluppo Sostenibile identificati dalle Nazioni Unite:

#### **Obiettivo 3: Salute e benessere**

Fra le attività individuate come contributo a questo obiettivo si segnalano lo sviluppo di biosensori per il monitoraggio di importanti metaboliti; la messa a punto di idrogel per il rilascio controllato di farmaci; ottimizzazione di un processo ecosostenibile per la sintesi di composti con attività antibatterica, antifungina e antiparassitaria e loro applicazione; lo sviluppo di nanomacchine e nanoswitch basati su DNA sintetico per applicazioni in campo diagnostico attraverso la misura di un ampio spettro di target molecolari tra cui

sequenze specifiche di DNA, proteine, anticorpi e piccole molecole; la formulazione di mezzi di contrasto fotoacustici che permettono di passare dall'imaging preclinico allo studio clinico e realizzare nuove piattaforme teranostiche (imaging + terapia) per diagnosi precoce, quali mezzi di contrasto multimodali per ecografia e risonanza magnetica capaci di attuare un rilascio localizzato di farmaci; lo sviluppo di dispositivi dosimetrici per la misurazione in situ di radiazione ionizzante sul paziente; simulazioni di dinamica molecolare di supporto all'attività di sviluppo di peptidi antimicrobici o terapeutici per la cura di varie patologie.

#### Obiettivo 7: Energia pulita e accessibile

Le ricerche condotte da molti anni su materiali e dispositivi per conversione e accumulo di energie rinnovabili hanno permesso di raggiungere importanti risultati su diversi dispositivi quali celle a combustibile polimeriche, a ossidi solidi e microbiche. Se accoppiate a dispositivi per la produzione di idrogeno basati sull'utilizzo di fonti energetiche rinnovabili (ad es. dispositivi fotovoltaici), le celle a combustibile rappresentano il nucleo di un sistema completo per la produzione di energia a impatto zero. Rilevante anche l'attività su sistemi fotovoltaici di quarta generazione basati su materiali a struttura perovskitica e celle solari a colorante organico. Attiva è anche la ricerca su sistemi di accumulo quali batterie redox a flusso, dispositivi che permettono di accumulare a basso costo quantità di energia maggiori delle batterie tradizionali, il cui sviluppo è oggetto di un progetto H2020-FTIPilot (GREENERNET). Di tutti questi dispositivi sono già stati costruiti prototipi da laboratorio.

#### Obiettivo 11: Città e comunità sostenibili

L'UNESCO identifica in questo obiettivo la conservazione e protezione del patrimonio culturale come centrale per sviluppare comunità sostenibili e nel DSTC sono oggetto di studio diverse metodologie e diagnostiche per la protezione e conservazione dei beni culturali. Ad es., sono stati preparati idrogel che permettono una pulitura di opere d'arte sicura sia per le opere stesse (evita la pulitura ad umido che può portare alla dissoluzione di componenti), sia per gli operatori (i materiali sono usati in campo medico e alimentare). Le attività del progetto saranno volte a sviluppare e implementare materiali sostenibili a base gel, in grado di rimuovere da opere, in maniera sicura e one-step, contaminanti liposolubili (colla, residui di grasso, prodotti di degradazione) senza l'uso di solventi.

Dal punto di vista diagnostico, è oggetto di studio un sistema analitico semplice, trasportabile ed economico che possa essere utilizzato in continuo direttamente sull'opera, in grado di fornire in tempo reale risultati specifici e di facile lettura sullo stato di conservazione e sull'efficacia di pulitura effettuata durante un restauro. Il prototipo attuale, un kit diagnostico basato su sensori elettrochimici, ha dimensioni adattabili alle opere in esame, ed è stato utilizzato in collaborazione con l'ICRCPAL, per trattare , opere cartacee diverse per dimensioni e importanza storica.

#### Obiettivo 12: Consumo e produzione responsabili

Nel settore riguardante la valorizzazione di risorse naturali rinnovabili, le attività si inquadrano in processi integrati di bioraffineria. Tra queste, lo sviluppo di celle a combustibile microbiche (MFC) e la valorizzazione di biomasse vegetali. Le MFC sono dispositivi che utilizzano come combustibile scarti dell'industria agro-alimentare o acque reflue urbane e in cui la generazione di energia elettrica deriva dai processi metabolici di batteri esoelettrogeni. La ricerca è focalizzata sullo sviluppo di catalizzatori nanostrutturati che possano sostituire il platino attualmente utilizzato con importanti riduzioni dei costi. La produzione di tali catalizzatori ben si coniuga con l'obiettivo 7.

La ricerca mediante un approccio sostenibile (solventi sostenibili, riciclo dei solventi, in batch e mediante tecniche di flusso) relativa allo sviluppo di processi di frazionamento di biomasse vegetali, in particolare lignine, ha portato all'ottenimento di frazioni pure e consistenti di polifenoli, impiegati in formulazioni di prodotti per la cura della casa e della persona in collaborazione con piccole e grandi industrie.



#### Obiettivo 13: Agire per il clima

La consolidata esperienza nello sviluppo di sensori chimici innovativi, assieme alle più tradizionali tecniche cromatografiche, ha condotto a dispositivi per la rilevazione di contaminanti delle diverse matrici ambientali: aria, terra e acqua. Sono stati sviluppati sensori e biosensori a elevata selettività che, grazie all'uso di materiali nanostrutturati, hanno permesso un importante avanzamento nell'analisi ambientale. Inoltre, sono stati sviluppati sistemi sensoriali artificiali destinati sia all'analisi di inquinanti emergenti di acque che di matrici complesse in fase gassosa.

#### ANALISI DELLA SITUAZIONE E INTERVENTI CORRETTIVI:

Al DSTC afferiscono 47 Professori e Ricercatori e 17 unità di personale TAB. Sono inoltre in servizio, reclutati su fondi dipartimentali, 5 RTD A e numerosi collaboratori alla ricerca (assegnisti, borsisti e dottorandi).

La qualità delle ricerche è stata dimostrata dal risultato ottenuto nella VQR 2011/2014 condotta dall'ANVUR. Il DSTC si classifica al quarto posto nell'Area delle Scienze Chimiche tra le Università italiane con indicatore ISPD (Indicatore standardizzato di performance dipartimentale che compara aree omogenee su base nazionale) pari a 98/100. Il DSTC è inoltre identificato dal MIUR come uno dei 350 Dipartimenti di eccellenza nelle Università italiane. Non si segnalano addetti inattivi e la partecipazione alle procedure VQR è stata del 100%.

I numerosi progetti europei e nazionali finanziati negli anni (FP da IV a VII, H2020, ERC, International MSCA, Tempus Fare, Concerted Actions, PRIN, FIRB, FISR, Industria2015, POR, FESR, Regione Lazio ecc.) e i contratti di ricerca con enti pubblici e privati hanno portato allo stabilirsi di solide relazioni con i migliori gruppi internazionali e con piccole, medie e grandi imprese e con CNR e ISTM. La collaborazione con gruppi di ricerca internazionali di elevato profilo ha consentito una forte crescita scientifica dei nostri più giovani ricercatori tramite Marie Curie Actions, Laboratori Congiunti e Progetti MAE di Grande Rilevanza, COOPERLINK-MIUR e scambi culturali ERASMUS, Tempus Mundus e COST.

Il DSTC ha attivi alla data odierna numerosi progetti di eccellenza:

Progetto Europeo RE-IMMUNE n. 798565

Progetto Europeo INITIO - G.A. n° 828779

Progetto Europeo Smart BioSense - Contratto n. 799332

Progetto Europeo ENDOSCAPE - Contratto n. 825730

Progetto Europeo "Nano-Supremi" - Contratto n° 690901

Theraglio Project - G.A. n° 602923

Progetto Europeo SMS - G.A. n° 613844

Progetto Europeo SMS - G.A. n° 613844

1 ERC starting grant, 1 ERC Proof of Concept, 1 FET-open, 3 IRSES, 4 MCSA e 8 progetti di ricerca FP7 o H2020, 1 progetto JDRF (Juvenile Diabetes Research Foundation), 2 progetti AIRC, 3 PRIN, un progetto INAIL "BRIC" e 2 progetti finanziati dai Min. della Salute e della Difesa.

Nel 2018 il DSTC ha acquisito fondi da progetti competitivi nazionali (ca. 623 k€), internazionali (ca. 4619 k€) e da contratti conto/terzi (ca. 145 k€) con incrementi rispetto al 2017 rispettivamente di più del 60%, del 280% e del 20%.

Sono inoltre attivi una serie di Accordi Internazionali firmati con l'Ateneo: Technion, Israele; Deakin University, Australia; International Center for Materials Nanoarchitectonics (MANA) - National Institute of Material Science (NIMS), Giappone; Uniwersytet Jagiellonski w Krakowie, Polonia; Ehime University,

Giappone; Université du Québec, Canada; Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics ITMO, Russia; Centro di Ingegneria Genetica e Biotecnologie (CIGB) de l'Avana, Cuba.

Nell'ambito delle collaborazioni nazionali e internazionali il DSTC ha ospitato i seminari di circa 20 esperti provenienti da importanti istituzioni di ricerca nazionali e internazionali e un ciclo di Lezioni dottorali tenute dal visiting Professor Dirk Guldi, Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Germania.

#### AZIONI DI MIGLIORAMENTO GIÀ INTRAPRESE ED ESITI 2018

Le principali criticità sono rappresentate da una non completa interazione tra i gruppi di ricerca, dal ridotto turn-over del personale docente e tecnico-amministrativo e dalle difficoltà relative all'ammodernamento delle grandi strumentazioni. Tali criticità vengono affrontate rafforzando la multidisciplinarietà della ricerca, aumentando ulteriormente la visibilità internazionale e la collaborazione con il mondo non accademico, aggiornando e implementando la dotazione strumentale e infrastrutturale, il reclutamento, e la mobilità dei dottorandi.

Le azioni intraprese, alla luce di entrambi gli obiettivi strategici, sono basate sul consolidamento della qualità della ricerca. In particolare, l'impatto citazionale delle pubblicazioni (pesato per la media mondiale di pubblicazioni simili) è passato dal valore 1,25 del 2017 al valore 1,57, ovvero il 57% in più della media mondiale e il 38% in più di quanto atteso sulla base dei risultati precedenti. Il numero di pubblicazioni nel percentile più citato (top 10%) è inoltre superiore al 27%. Anche questo indicatore risulta dunque incrementato rispetto al valore del 25% registrato nel 2017 (fonte: Scopus).

In particolare, relativamente agli obiettivi individuati si può rilevare:

##### - R1.1

Si registrano sulla banca dati d'Ateneo più di 20 pubblicazioni con autori di diversi gruppi di ricerca. Per favorire ulteriormente la collaborazione tra gruppi di ricerca è stata avviato un censimento della strumentazione del Dipartimento e iniziato il processo di definizione della regolamentazione dell'accesso alla strumentazione comune.

È stato inoltre iniziato un grande progetto, in regime di cofinanziamento da parte dell'Ateneo, di ristrutturazione e adeguamento alle più recenti normative relative alla sicurezza e prevenzione dei rischi per il laboratorio NMR. Tale attività permetterà in tempi brevi di incrementare l'ospitalità di studiosi, esponenti istituzionali, operatori industriali, commerciali e finanziari interessati all'utilizzo della strumentazione del DSTC.

##### - R1.2

In aggiunta al succitato Laboratorio NMR, il DSTC ha ottenuto per il laboratorio di Certificazione di Analisi e Processi (LabCAP) la certificazione UNI EN ISO 9001. LabCAP è quindi una struttura di ricerca, di didattica e di servizio le cui principali funzioni saranno sempre più attività di consulenza e conto terzi a favore di enti pubblici e/o privati. Le attività si integreranno con quelle di didattica, terza missione e trasferimento tecnologico promuovendo, tra l'altro, l'organizzazione di stage di studenti, dottorandi e personale di ruolo presso aziende e istituzioni italiane ed estere e parallelamente curando l'accoglienza e l'ospitalità di studiosi, esponenti istituzionali, operatori industriali, commerciali e finanziari interessati allo sviluppo di azioni di comune interesse. LabCAP seguirà un Sistema Qualità operando in conformità ai requisiti della norma.



Il reclutamento di RTD avviato, assieme alla politica di Ateneo volta a favorire la mobilità dei Dottorandi, ben si inseriscono nella strategia di incrementare la visibilità del DSTC.

Per quel che attiene l'obiettivo R2 dell'Ateneo (internazionalizzazione della ricerca) i principali obiettivi sono:

- R2.1

Il trend delle collaborazioni internazionali del DSTC è piuttosto costante nel tempo (2009-2018) con una media nel decennio pari al 42,5%. Nel 2018 si è registrato un aumento di più di due punti percentuali rispetto all'anno precedente.

- R2.2

Per quel che attiene alla partecipazione a conferenze o congressi internazionali, circa l'80% dei componenti del Dipartimento ha presentato i risultati ottenuti nell'ambito di tali eventi.

- R2.3

Il rafforzamento della didattica dottorale con cicli di lezioni e seminari tenuti da illustri scienziati stranieri cfr i succitati Seminari e il ciclo di lezioni dottorali tenute dal Prof. Guldi.

In questo ambito il DSTC ha impegnato più di 80K€ per la mobilità di oltre 30 dottorandi (Scienze Chimiche e MHEE) per partecipazione a congressi o per brevi periodi di ricerca in laboratori.

#### PRODOTTI DELLA RICERCA 2018

Il numero totale di pubblicazioni è stabile rispetto agli anni precedenti. Le attività di ricerca hanno portato, nell'anno 2018, a una media di più di 3 pubblicazioni per unità di personale su riviste internazionali ISI/SCOPUS a elevato fattore di impatto e numerosi contributi a Conferenze Nazionali e Internazionali, in leggero incremento rispetto al 2017.

I componenti del DSTC sono stati insigniti di numerosi riconoscimenti tra cui si segnalano:

Premio per preclari meriti didattici e scientifici attribuito dall'Associazione Italiana di Chimica per l'Ingegneria (AICIng) alla Prof.ssa Silvia Licocchia

Alla Dr.ssa F. Cavalieri è stato conferito l'Outstanding Oral Presentation Award, ICONAN2018.

Il Dott. A. Bertucci, collaboratore del Prof. Francesco Ricci e assegnista presso il nostro Dipartimento, è stato selezionato tra i tre finalisti per il premio "ISSNAF Award for Young Investigators"

il Dott. P. Ulpiani, Dottorando in MHEE, ha vinto la prima edizione del Premio SIF-SoNS "Neutrons Matter" 2018.

Il Professor F. Ricci ha ricevuto il premio "Advances in Measurement Science Lectureship Award".

La Dr.ssa Y. Toumia, ha ricevuto il premio per la miglior ricerca su microdroplets al 23rd European Symposium on Ultrasound Contrast Imaging, Gennaio 2018

#### RESPONSABILITÀ SCIENTIFICHE, EDITORIALI E PUBBLICISTICHE 2018

Prof. E. Di Bartolomeo: Workshop internazionale e pubblicazione dei proceedings in qualità di editore: Workshop for young ceramists "Promoting your research results" November 26-27, 2018

Nel DSTC si svolge una qualificata attività editoriale per riviste scientifiche appartenenti al primo o secondo quartile (classificazione Scimago). A titolo di esempio si segnala:

Editor: Biosensors & Bioelectronics, Elsevier, Q1 (Moscone);

Editor in Chief: Materials for Renewable and Sustainable Energy, Elsevier, Q2 (Traversa)

Associate Editor, J. of Porphyrins and Phthalocyanines, World Scientific, Q2 (Paollesse)



Editorial Advisory Board: Accounts of Chemical Research, American Chemical Society, Q1 (Bietti), Analytical Bioanalytical Chemistry, Springer, Q1 (F. Ricci), Materials for Renewable and Sustainable Energy, Elsevier, Q2 (Licoccia) J. of Peptide Science, Wiley, Q2 (Stella)

L'attività di disseminazione delle ricerche e internazionalizzazione è condotta anche attraverso la presentazione di contributi su invito e la partecipazione all'organizzazione di numerosi convegni nazionali e internazionali quali (a titolo esemplificativo) International Conference of Young Researchers on Advanced Materials, November 2018 Adelaide, South Australia (F. Cavaliere), International Vanadium Symposium, Novembre 2018, Montevideo Uruguay (V. Conte Chair, P. Galloni Scientific committee); The International Conference CBRNE (2nd, 3rd) - Research & Innovation (F. Arduini); 3<sup>rd</sup> International Conference on Proton-Coupled Electron Transfer, Giugno 2018, Blowing Rock, (NC) USA (M. Bietti); EuChEMS Conference on Organic Free Radicals, Giugno 2018, Marsiglia Francia (M. Bietti); International Advisory Board della "NANOSMAT Conference" (R. Polini); Workshop on Bioactive Peptides (Comitato Scientifico L. Stella)

#### ATTIVITÀ DI TERZA MISSIONE 2018

Il DSTC ha un consolidato e ampio spettro di attività di terza missione che favorisce l'applicazione diretta, la valorizzazione e l'impiego della conoscenza per contribuire allo sviluppo sociale, culturale ed economico del territorio e dei suoi attori principali, in particolare realtà industriali e istituti della formazione, al duplice scopo di promuovere l'interazione col tessuto industriale e di accrescere le competenze di cittadinanza consapevole, in particolare per quanto riguarda l'educazione ambientale. A livello regionale il DSTC sostiene l'attività industriale mediante fornitura di servizi di analisi di prodotti per piccole, medie e grandi aziende e consorzi FATER, CHEMI, WFS Ground, Costec, Harditalia srl, MAVI sud, CNCCS, Cosmed, FILMS SpA.

A livello nazionale e internazionale, risultati significativi sono stati ottenuti attraverso lo sviluppo di nuovi metodi analitici aumentando la competitività nazionale e internazionale di piccole e medie industrie (Viscolube, Soleko, Schalcon, Plada, IRSVEM, Biomedica Foscama) e con gruppi multinazionali (Procter & Gamble, Fater, Bridgestone, Stora Enso, Marangoni, Patheon, ACS-DOBFAR, Sanofi-Aventis, Bristol-Myers, Squibb, FCA, Fidia Farmaceutici).

Il coinvolgimento delle industrie nei progetti nazionali e internazionali approvati ha avuto un notevole impatto economico e alcuni prodotti (Menarini, Systea, Parmalat, Microbia) sono attualmente disponibili commercialmente.

Alcuni dei componenti del DSTC sono coinvolti in attività brevettuali e di istituzione di Start-up e Spin-off (ad esempio Tecnosense, BTINNOVACHEM).

Le ricercatrici Dott.ssa Emanuela Gatto e Dott.ssa Claudia Mazzuca assieme ai collaboratori Valentina Armuzza, ex studentessa del nostro Corso di Laurea in Chimica, si sono aggiudicate il Primo Premio Start Cup Lazio 2018 con il Progetto "SPlastica: plastica sostenibile". SPlastica ha quindi partecipato al PNI, Premio Nazionale per l'Innovazione, promosso dalla rete nazionale degli incubatori di impresa universitari (PNI Cube).

Il DSTC promuove inoltre attività culturali quali organizzazione di convegni, conferenze, dibattiti, seminari, mostre, concerti, partecipazione a trasmissioni radiofoniche, televisive e a incontri e dibattiti ed eventi divulgativi (Notte dei Ricercatori, Scienza Orienta, dedicata alla divulgazione scientifica e all'orientamento per gli studenti delle scuole secondarie di secondo grado; Giochi della Chimica della Società Chimica Italiana, Maker Fair) e attività di formazione (PLS, corsi di aggiornamento teorico/pratici di specializzazione, alternanza Scuola Lavoro, Lezioni di Chimica Sostenibile per Winter School di Macroarea).

I membri del gruppo MaDE@UTV (Silvia Licoccia, Barbara Mecheri, Alessandra D'Epifanio e Cadia D'Ottavi), in collaborazione con l'Associazione Donne della Vite, hanno svolto attività di disseminazione delle ricerche sul tema dei sistemi bioelettochimici al fine di promuovere l'interazione tra la ricerca scientifica e il tessuto agro-industriale. Tale attività, svolta nell'ambito del progetto AGER BIOVALE



finanziato da AGER (Agroalimentare e ricerca), ha presentato agli stakeholder del settore enologico un modello innovativo di bioraffineria, dimostrando come sia possibile valorizzare gli scarti della filiera vitivinicola, recuperando energia elettrica o idrogeno dal loro trattamento in dispositivi bioelettrochimici.