

## Progetto di TESI: RIMOZIONE DI INQUINANTI EMERGENTI DALLE ACQUE MEDIANTE PROCESSI DI OSSIDAZIONE AVANZATA, IN PRESENZA DI MATERIALI DERIVATI DA BIOMASSE RESIDUALI

**Unità di ricerca:** Prof.ssa Alessandra Bianco Prevot

**Collaborazioni:** Dr.ssa D. Fabbri, Dott.ssa S. Berto, Dr. M. Minella, Prof.ssa G. Magnacca, Dr. E. Laurenti

**Docente di riferimento:** Prof.ssa Alessandra Bianco Prevot E-mail: [alessandra.biancoprevot@unito.it](mailto:alessandra.biancoprevot@unito.it); Tel. 011 670 5292

**Disponibile dal:** 01/10/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale

### Introduzione

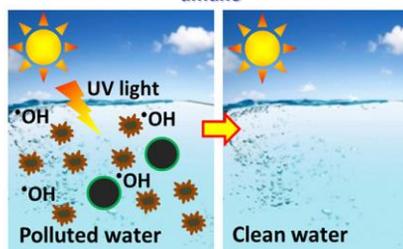
Negli studi in ambito ambientale, per garantire la qualità delle acque destinate al consumo umano, animale e ad uso agricolo, è di grande attualità lo studio dei cosiddetti inquinanti emergenti (farmaci, conservanti, ritardanti di fiamma,...), sostanze presenti a bassissime concentrazioni che possono costituire una fonte di rischio per la salute a causa della loro tossicità intrinseca o legata ai loro prodotti di trasformazione o a seguito di fenomeni di accumulo.

Un'altra tematica con importanti ricadute ambientale è quella della gestione dei rifiuti, in particolare della frazione organica. E' stato dimostrato che le biomasse residuali possono essere fonte di sostanze (BBS) in grado di promuovere la fotodegradazione di inquinanti organici e che quindi si prestano ad essere utilizzate anche per la rimozione degli inquinanti emergenti.

### Obiettivo e metodologie sperimentali

- Isolare nuove BBS a partire da diverse tipologie di biomasse residuali e caratterizzarle dal punto di vista strutturale e delle proprietà chimico-fisiche (NMR, ICP-AES, IC, TOC, potenziometria, tensiometria)
- Preparare e caratterizzare fotosensibilizzanti ibridi BBS-magnetite che possano essere recuperati al termine della degradazione degli inquinanti e riutilizzati in modo da minimizzare la produzione di scarti (XRD, TGA, SEM, TEM, FTIR, Simulatori solari)
- Ottimizzare i processi di degradazione degli inquinanti (effetto pH, aggiunta ossidanti ausiliari, sorgente di irraggiamento)
- Determinare i prodotti di degradazione (HPLC-MS) ed identificare le specie reattive (EPR)

*Materiali ibridi ossidi metallici-BBS come fotocatalizzatori per la degradazione di inquinanti emergenti presenti in acque destinate al consumo umano*



☀️ caffeine

● magnetic-BBS from...

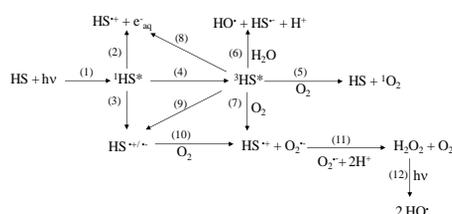


... compost

*Studio del meccanismo di produzione di specie reattive ossidanti mediante irraggiamento di BBS*



BBS hanno comportamento analogo alla sostanza umica HS



**Altre informazioni:** Alcune attività verranno condotte presso i laboratori di ricerca di Via Quarellò.

E' possibile svolgere parte della tesi presso il Campus di Alcoy dell'Università Politecnica di Valencia, Spagna (ERASMUS).

Sono attive altre collaborazioni in Francia, (Clermont-Ferrand) ed in Argentina (La Plata, Neuquen)

## Progetto di TESI: NUOVI MOF (Metal Organic Frameworks) A BASE DI ZUCCHERI E SALI INORGANICI PER LO SVILUPPO DI SENSORI BIOLOGICI E PER LA RADIOTERAPIA

**Unità di ricerca:** Prof.ssa Domenica Marabello, Prof.ssa Paola Benzi, Prof.ssa P. Antoniotti

**Collaborazioni:** Prof. Carlo Canepa, Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Scienza e Tecnologia del farmaco, INRIM – Istituto Nazionale di Ricerca Metrologica

**Docente di riferimento:** Prof.ssa Domenica Marabello E-mail: domenica.marabello@unito.it; Tel. 011 670 7505

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale

### Introduzione

Nell'ambito della farmacologia moderna sono di grande interesse sistemi per la teranostica, ovvero sistemi che funzionano da sensori biologici e contemporaneamente sono in grado di funzionare da farmaco vero e proprio. In questa ottica nel nostro laboratorio si stanno sviluppando MOF che si possono ottenere facilmente in forma nanoparticellare e che presentano proprietà di ottica non lineare (NLO), per cui potranno essere utilizzati come biosensori in vitro. Contemporaneamente tali composti possono essere facilmente sintetizzati con isotopi radioattivi, utili per la radioterapia per la cura del cancro. Le nanoparticelle in esame possono essere funzionalizzate con anticorpi monoclonali o con altri metodi per concentrarle maggiormente all'interno delle cellule cancerogene, limitando così gli effetti collaterali della terapia.

### Obiettivo

Sintetizzare nuovi MOF a base di zuccheri e Sali inorganici in modo da 1) aumentare l'intensità della seconda armonica emessa dalle nanoparticelle e renderle quindi più «visibili» in vitro, 2) controllare la dimensione delle nanoparticelle per facilitare il loro inserimento nelle cellule cancerogene.

### Metodologie sperimentali

**Sintesi.** Sintesi e cristallizzazione in soluzione in assenza di ossigeno e temperatura controllata. Metodi di ricopimento e funzionalizzazione delle nanoparticelle.

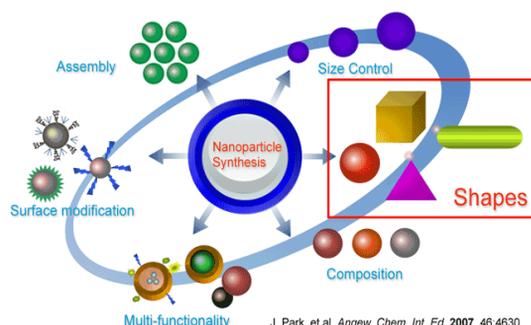
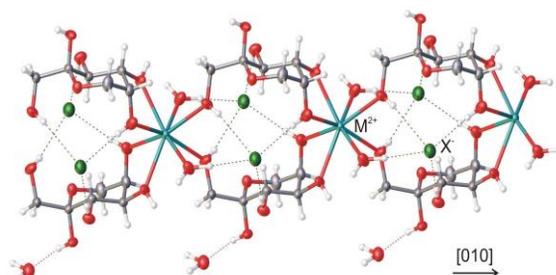
**Caratterizzazione strutturale.** Mediante diffrazione dei raggi X per cristallo singolo, diffrazione dei raggi X per polveri cristalline, spettroscopia IR, UV, VIS.

**Studio ab inizio delle proprietà NLO.** Studio mediante tecniche computazionali della struttura e delle proprietà correlate all'emissione di seconda armonica (polarizzabilità, iperpolarizzabilità, suscettività ottica).

**Misure NLO.** La capacità di generare la seconda armonica sarà testata mediante una nuova tecnica microscopica sviluppata dall'INRIM.

### Altre informazioni

*Non-linear optical properties of b-D-fructopyranose calcium chloride MOFs: an experimental and theoretical approach*, D. Marabello, P. Antoniotti, P. Benzi, C. Canepa, E. Diana, L. Operti, L. Mortati, M. P. Sassi, *J. Mater. Sci.*, **50**, 12 (2015), 4330-4341



## Progetto di TESI: "Additive manufacturing" di leghe metalliche

**Unità di ricerca:** Prof. Livio Battezzati, Dott. Alberto Castellero

**Collaborazioni:** Progetto regionale STAMP

**Docenti di riferimento:** Prof. Livio Battezzati; E-mail: livio.battezzati@unito.it; Tel. 011 670 7567

Dott. Alberto Castellero; E-mail: [alberto.castellero@unito.it](mailto:alberto.castellero@unito.it); Tel. 011 6707097

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale

### Introduzione

#### Fabbrica intelligente

- Produzione "custom made"
- Minimizzazione magazzino
- Alleggerimento componenti



#### Manifattura additiva di componenti

- Fusione di polveri metalliche mediante sistemi laser a partire da un disegno CAD

#### Obiettivi

- Confronto delle microstrutture di componenti metallici ottenuti mediante additive manufacturing, processi industriali tradizionali e processi metallurgici di laboratorio di non equilibrio.
- Calcolo di diagrammi di stato di non equilibrio per prevedere formazioni di fasi nel processo di additive manufacturing.

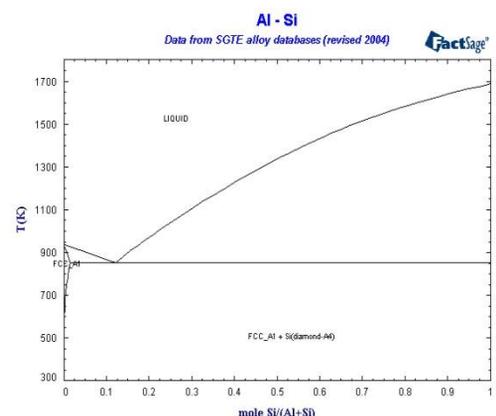
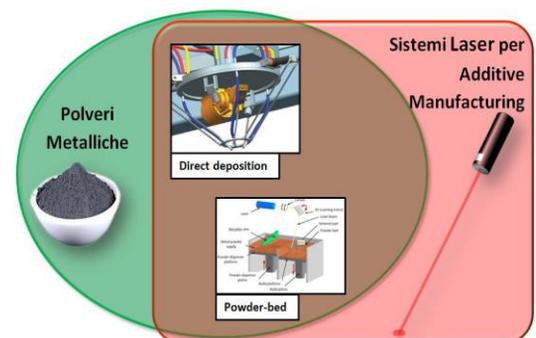
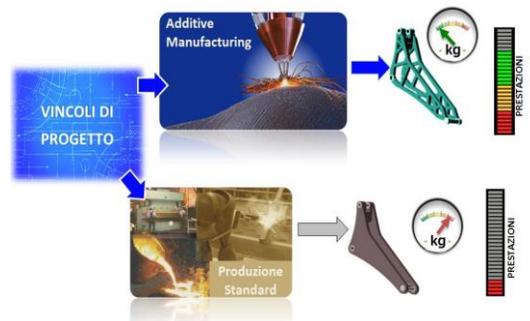
#### Metodologie sperimentali

**Preparazione.** Solidificazione di leghe metalliche a diverse velocità di raffreddamento (colata in stampo, melt-spinning, laser melting).

**Caratterizzazione strutturale e microstrutturale.** Diffrazione di raggi X, microscopia elettronica in scansione (SEM), microscopia elettronica in trasmissione (TEM).

**Calcolo diagrammi di fase:** CALPHAD.

**Proprietà meccaniche.** Misure di indentazione strumentata per la determinazione di durezza e modulo di Young.



## Progetto di TESI: Idruri complessi per elettroliti allo stato solido

Unità di ricerca: Prof. Marcello Baricco

### Collaborazioni:

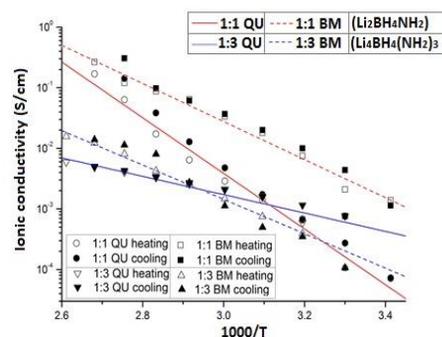
Docente di riferimento: Prof. Marcello Baricco; E-mail: marcello.baricco@unito.it; Tel. 011 670 7569

Disponibile dal: 01/02/2017

Tipologia: Tesi Sperimentale

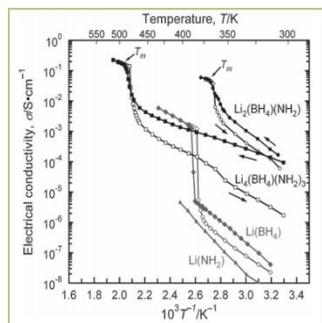
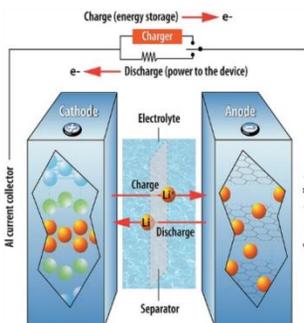
### Introduzione

- Gli idruri complessi possono essere utilizzati come elettroliti allo stato solido in batterie.
- La conducibilità dipende dal metodo di sintesi (tempra del fuso vs. macinazione di polveri).
- Effetto di interfacce e interfasi sul meccanismo di conducibilità ionica



### Obiettivi

- produzione di materiali innovativi anodici e catodici per batterie
- materiali ad elevata conducibilità di ioni Li<sup>+</sup> da utilizzare come elettroliti solidi (LiBH<sub>4</sub>)
- aumento della capacità specifica di accumulo
- incremento delle potenze erogate



Toyota  
Mirai  
FCEV

EC STORE

Marie Curie ITN



<http://ecostore.hzg.de/index.html.en>

### Metodologie sperimentali

Sintesi. Meccanochimica, tempra da fuso.

Caratterizzazione termica. Calorimetria differenziale a scansione (DSC).

Caratterizzazione strutturale e microstrutturale. Diffrazione di raggi X. Microscopia elettronica.

## Progetto di TESI: Idruri complessi per elettroliti allo stato solido



**Unità di ricerca:** Prof. Marcello Baricco, prof. Alberto Castellero, prof. Paola Rizzi,

in collaborazione con prof. Carlo Nervi, prof. Roberto Gobetti, prof. Michele Chierotti

**Collaborazioni:** Attività di ricerca nell'ambito di **progetti europei**, in collaborazione con Università di Ginevra (Svizzera), Aarhus (Danimarca), Sendai (Giappone), CNRS (Parigi)

**Docente di riferimento:** Prof. Marcello Baricco; E-mail: marcello.baricco@unito.it; Tel. 366 7877 947

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale e Teorica



<http://ecostore.hzg.de/index.html.en>

### Introduzione

- Gli idruri complessi possono essere utilizzati come elettroliti in **batterie allo stato solido**, che riducono sensibilmente i rischi di incendio nelle batterie al Litio.
- La **conduttività ionica** dipende dalla struttura cristallina, dalla composizione e dal metodo di sintesi.
- Per migliorare le possibili applicazioni industriali occorre studiare **l'effetto di interfaccia e interfasi** sul meccanismo di conducibilità ionica.

### Obiettivi scientifici

- **Preparazione** di materiali innovativi per elettroliti allo stato solido mediante alligazione meccanica.
- **Caratterizzazione** strutturale, spettroscopica, termica e determinazione della conducibilità ionica.
- **Ottimizzazione** della struttura cristallina, mediante combinazione di metodi DFT e di analisi topologica.
- Studio della **relazione** tra la struttura cristallina e la conducibilità ionica.

### Metodologie sperimentali e teoriche

**Sintesi:** Meccanochimica, da soluzione.

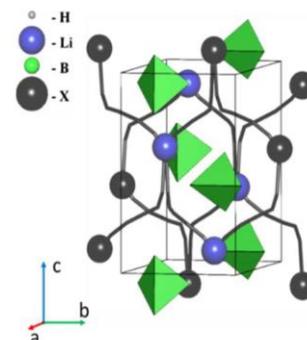
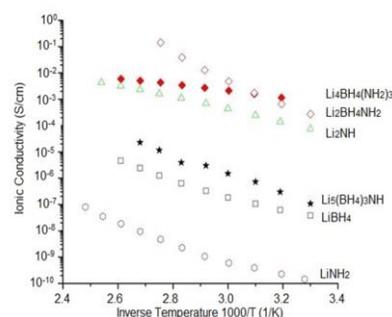
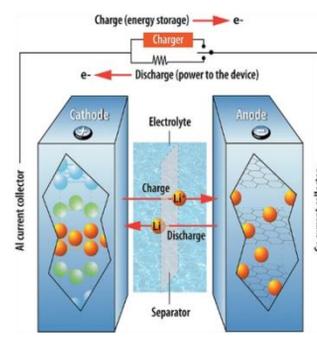
**Caratterizzazione termica:** Calorimetria differenziale a scansione (DSC) analisi termogravimetrica (TGA).

**Caratterizzazione strutturale e microstrutturale:** Diffrazione di raggi X. Microscopia elettronica.

**Caratterizzazione spettroscopica:** NMR stato-solido, Raman, ATR

**Caratterizzazione elettrochimica:** spettroscopia di impedenza (EIS), voltammetria ciclica (CV).

**Metodi teorici:** DFT ed analisi topologica, analisi termodinamica e cinetica delle trasformazioni di fase, studio dei diagrammi di fase (Calphad).



### Progetto di TESI: Materiali ed impianti per l'immagazzinamento di idrogeno



**Unità di ricerca:** Prof. Marcello Baricco, prof. Alberto Castellero, prof. Paola Rizzi in **collaborazione con aziende del territorio piemontese.**

**Collaborazioni:** Attività di ricerca nell'ambito di **progetti europei**, in collaborazione con HZG (Germania), Università di Aarhus (Danimarca), Sendai (Giappone), CNRS (Parigi)

**Docente di riferimento:** Prof. Marcello Baricco; E-mail: marcello.baricco@unito.it; Tel. 366 7877 947

**Disponibile dal:** 01/02/2017

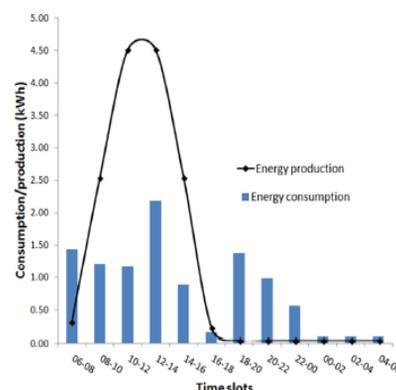
**Tipologia:** Tesi Sperimentale e Teorica

POLO DI INNOVAZIONE  
ENERGY AND CLEAN TECHNOLOGIES



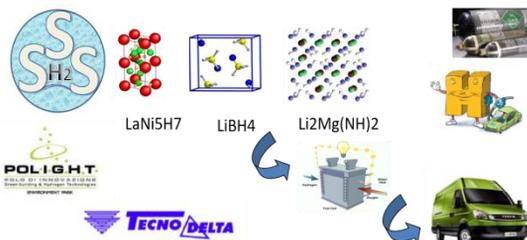
#### Introduzione

- **L'immagazzinamento di energia** resta un problema aperto per l'applicazione su vasta scala delle fonti rinnovabili.
- **L'idrogeno** è un potenziale vettore di energia per applicazioni stazionarie e mobile e la necessità di ottimizzare l'immagazzinamento dell'idrogeno richiede nuovi materiali e nuovi impianti.
- Vari materiali a base di idruri possono essere utilizzati per la realizzazione di **serbatoi allo stato solido**, che riducono sensibilmente i rischi ed i costi per l'immagazzinamento di idrogeno.
- Lo studio si inserisce nell'ambito di una **economia dell'idrogeno**.



#### Obiettivi scientifici

- **Preparazione** mediante alligazione meccanica di materiali innovativi con un'elevata densità gravimetrica di H<sub>2</sub> per l'immagazzinamento di idrogeno.
- **Caratterizzazione** strutturale, spettroscopica, termica e volumetrica.
- **Ottimizzazione** delle proprietà termodinamiche e cinetiche mediante combinazione di metodi DFT e di calcolo dei diagrammi di fase. Studio della **relazione** tra la struttura cristallina e l'immagazzinamento di idrogeno.
- **Sviluppo** di serbatoi per idrogeno ed analisi del ciclo di vita (LCA)



#### Metodologie sperimentali e teoriche

**Sintesi:** Meccanochimica, fusione in forno.

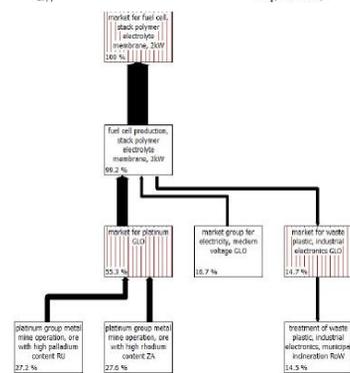
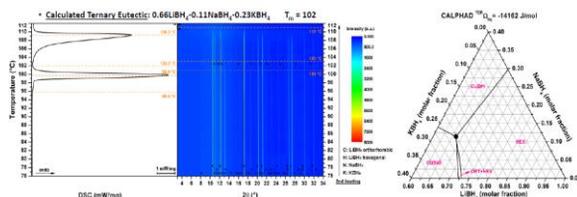
**Caratterizzazione termica:** Calorimetria differenziale a scansione (DSC) analisi termogravimetrica (TGA).

**Caratterizzazione strutturale e microstrutturale:** Diffrazione di raggi X. Microscopia elettronica.

**Caratterizzazione spettroscopica:** NMR stato-solido, Raman, ATR

**Assorbimento/desorbimento di gas:** Calorimetria ad alta pressione (HP-DSC), misure isoterme di pressione/composizione.

**Metodi teorici:** DFT ed analisi termodinamica e cinetica delle trasformazioni di fase, studio dei diagrammi di fase (Calphad).



### Progetto di TESI: Materiali termoelettrici per recupero di calore disperso

**Unità di ricerca:** Dott. Alberto Castellero, Prof. Marcello Baricco  
**Collaborazioni:** CNR-ICMATE (Lecco, Padova)  
**Docente di riferimento:** Dott. Alberto Castellero; E-mail: alberto.castellero@unito.it; Tel. 011 670 7097  
**Disponibile dal:** 01/02/2017  
**Tipologia:** Tesi Sperimentale

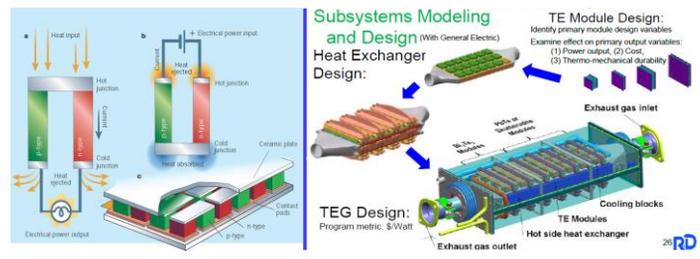
#### Introduzione

Conversione diretta di energia termica in energia elettrica (e viceversa)

✓ effetto Seebeck (termico -> elettrico)

$$\Delta V = \alpha \Delta T$$

✓ Effetto Peltier (pompa di calore)



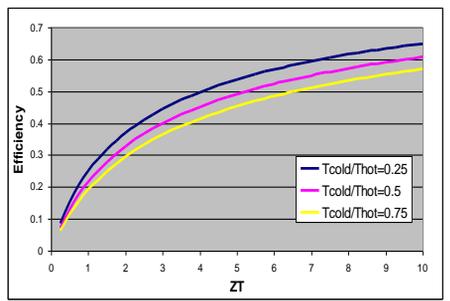
#### Efficienza conversione termoelettrica

$$\eta_{te} = \frac{T_{hot} - T_{cold}}{T_{hot}} \left[ \frac{\sqrt{1+ZT} - 1}{\sqrt{1+ZT} + T_{cold}/T_{hot}} \right]$$

Termine di Carnot      Proprietà intrinseche del materiale

$$ZT = \frac{\alpha^2 \sigma T}{K_{el} + K_{ph}}$$

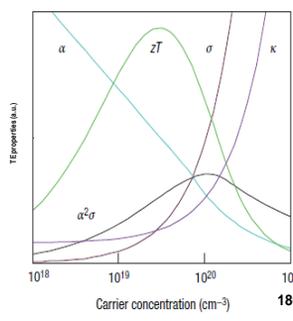
$\alpha^2 \sigma$  (fattore di potenza)       $K = K_{el} + K_{ph}$



#### Obiettivi

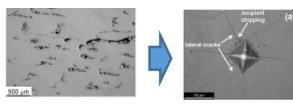
Ottimizzazione di:

- Proprietà termoelettriche
  - ↑  $\alpha$ : coefficiente Seebeck
  - ↑  $\sigma$ : conducibilità elettrica
  - ↓  $K_{el}$ : conducibilità termica elettronica
  - ↓  $K_{ph}$ : conducibilità termica fononica
- Processi di sintesi
- Proprietà meccaniche
- Processi di assemblaggio celle termoelettriche

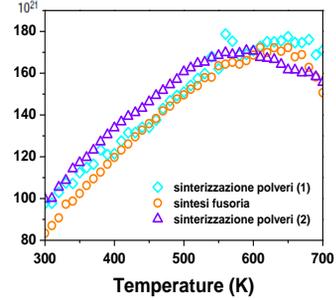
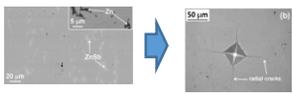


Drogaggio influenza  $\alpha$ ,  $\sigma$  e  $K_{el}$   
 Drogaggio non influenza  $K_{ph}$   
 $K_{ph}$  può essere disaccoppiato da  $K_{el}$  da difetti (puntuali, di superficie)

Sintesi fusoria



Sinterizzazione da polveri



#### Metodologie sperimentali

Sintesi. Metallurgia fusoria e delle polveri.

Caratterizzazione termica. Calorimetria differenziale a scansione (DSC), analisi termogravimetrica (TGA)

Caratterizzazione strutturale e microstrutturale. Diffrazione di raggi X, microscopia elettronica in scansione (SEM), microscopia elettronica in trasmissione (TEM).

Proprietà meccaniche. Indentazione strumentata, microdurezza Vickers.

## Progetto di TESI: Materiali per una economica circolare



**Unità di ricerca:** Prof. Marcello Baricco

**Collaborazioni:** altri Dipartimenti dell'Università di Torino (economica, sociologia, giurisprudenza).

**Docente di riferimento:** Prof. Marcello Baricco; E-mail: marcello.baricco@unito.it; Tel. 366 7877 947

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale e Teorica

### Introduzione

- **The Brundtland Report (1987):** lo sviluppo sostenibile è uno sviluppo che soddisfi i bisogni del presente senza compromettere la possibilità delle generazioni future di soddisfare i propri.
- **Economia circolare** è un termine per definire un sistema economico pensato per potersi rigenerare da solo.
- I **flussi di materiali** sono di due tipi: quelli biologici, in grado di essere reintegrati nella biosfera, e quelli tecnici, destinati ad essere rivalorizzati senza entrare nella biosfera.
- Il programma **Industria 4.0** del governo italiano è finalizzato allo sviluppo di una industria digitale e alla realizzazione di una economia circolare.

### Obiettivi scientifici

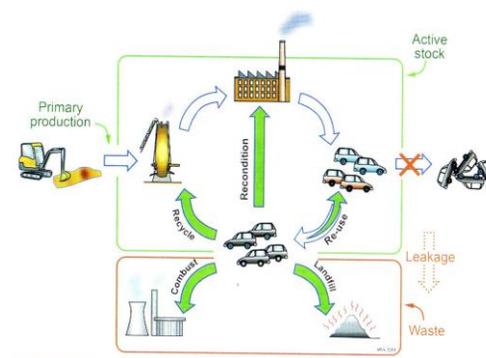
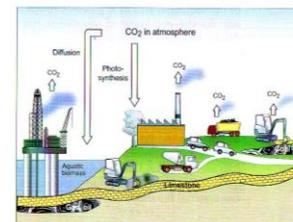
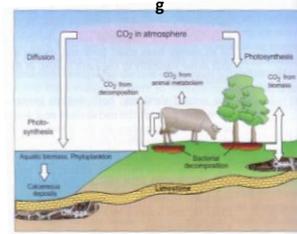
- La ricerca si propone di rispondere alle seguenti domande:
  - Come si fa a raggiungere uno **sviluppo sostenibile** per l'industria chimica?
  - Come si può misurare il **progresso** nel suo raggiungimento?
  - Che cosa significa **in pratica**?
  - Quale ruolo può giocare **l'industria chimica**?
- Studio del ruolo dei **materiali critici** nell'industria chimica.
- Analisi dei **cicli produttivi** di alcuni materiali e studio delle modalità di inserimento in una economia circolare.
- **Studio** del ciclo di vita di materiali e prodotti.

### Metodologie sperimentali e teoriche

- **Caratterizzazione** di materiali da riciclo nell'ambito di una economia circolare.
- Sviluppo di **tecnologie per il riciclo** dei materiali.
- Ottimizzazione dei **consumi energetici** di processi produttivi nell'industria chimica.
- Analisi dei **modelli di business** per l'industria chimica nell'ambito di una economia circolare.
- Analisi delle **normative** e degli aspetti legislativi legati all'economia circolare.
- Analisi del ciclo di vita (**LCA**) di materiali e prodotti.



www.ellenmacarthurfoundation.org



## Progetto di TESI: Materiali nanoporosi funzionali

**Unità di ricerca:** Prof. Livio Battezzati, Prof. Paola Rizzi

**Collaborazioni:** Progetto EU *VitriMetTech* e Progetto *SanPaolo Bingo*

**Docente di riferimento:** Prof. Livio Battezzati E-mail: [livio.battezzati@unito.it](mailto:livio.battezzati@unito.it); Tel. 011 670 7567

Prof. Paola Rizzi; E-mail: [paola.rizzi@unito.it](mailto:paola.rizzi@unito.it); Tel. 011 670 7565

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale

### Introduzione

- Dealligazione e proprietà elettrochimiche di leghe metalliche (a base di oro e altri metalli nobili)
- Dissoluzione selettiva di elementi meno nobili del componente principale
- Creazione di un network con porosità controllata
- Sinterizzazione di polveri a granulometria controllata

### Obiettivi

- Ottimizzazione e comprensione dei processi elettrochimici
- Caratterizzazione microstrutturali
- Verifica di proprietà elettrocatalitiche
- Verifica di proprietà diagnostiche
- Verifica della porosità e delle proprietà di trasporto passivo di fluidi

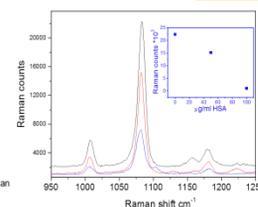
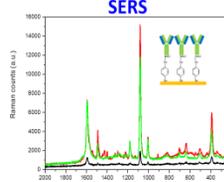
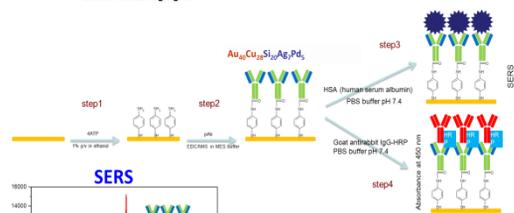
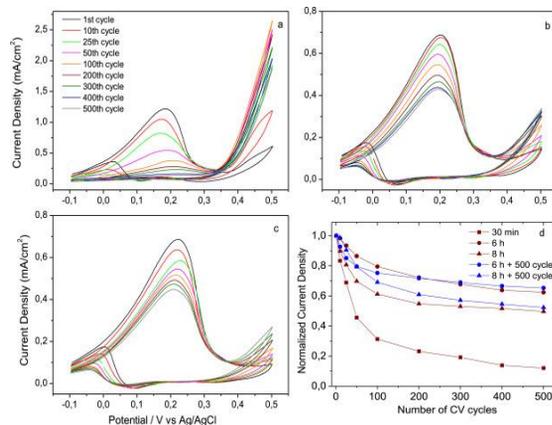
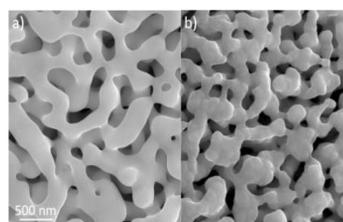
### Metodologie sperimentali

**Sintesi.** Rapida solidificazione di leghe metalliche. Dealligazione selettiva per via chimica o elettrochimica.

**Caratterizzazione strutturale e microstrutturale.** Diffrazione di raggi X, microscopia elettronica in scansione (SEM), microscopia elettronica in trasmissione (TEM), microscopia a forza atomica (AFM).

**Proprietà funzionali.**

- Elettro-catalisi dell'elettro-ossidazione del metanolo (voltammetria ciclica).
- Funzionalizzazione di oro nanoporoso con molecole selettive per diagnostica in soluzioni diluite mediante Surface Enhanced Raman Scattering (SERS).



1682  $\text{cm}^{-1}$  = C-S stretching vibrations  
 With an increase in the HSA concentration the Raman intensity decreases

## Progetto di TESI: Proprietà termofisiche di materiali metallici innovativi

**Unità di ricerca:** Prof. Livio Battezzati

**Collaborazioni:** Progetti ESA *ThermoProp* e *Liphase*

**Docente di riferimento:** Prof. Livio Battezzati E-mail: livio.battezzati@unito.it; Tel. 011 670 7567

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale

### Introduzione

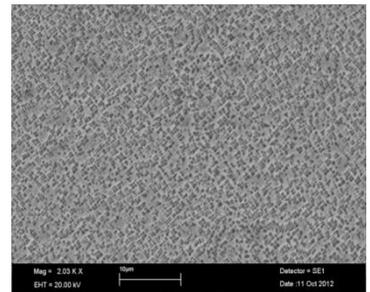
Modellizzazione processi fusione e solidificazione



Ottimizzazione tecnologie di produzione



Necessità di misure di proprietà termofisiche accurate, indipendenti dall'ambiente



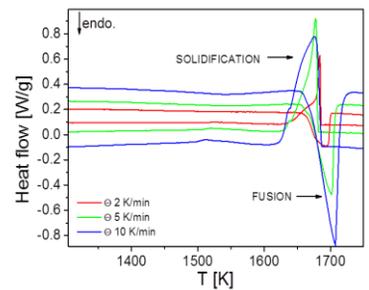
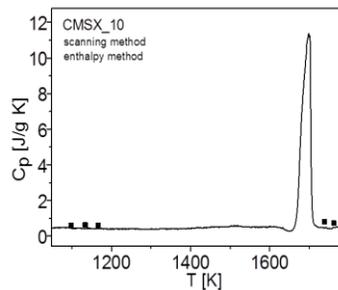
### Obiettivi

➤ Misure accurate di:

- Calore specifico
- Entalpie di fusione
- Intervalli di fusione e solidificazione

➤ Studio di:

- Solidificazione "containerless"
- Fenomeni di sottoraffreddamento del liquido



### Metodologie sperimentali

Caratterizzazione termica. Calorimetria differenziale a scansione (DSC), analisi termica differenziale (DTA), calorimetria drop.

Caratterizzazione strutturale e microstrutturale. Diffrazione di raggi X, microscopia elettronica in scansione (SEM), microscopia elettronica in trasmissione (TEM).

## Progetto di TESI: CONVERSIONE DI BIOMASSE IN PRODOTTI CHIMICI PER L'INDUSTRIA

**Unità di ricerca:** D.ssa Silvia Tabasso

**Collaborazioni:** Prof. Giancarlo Cravotto, D.ssa. Maela Manzoli

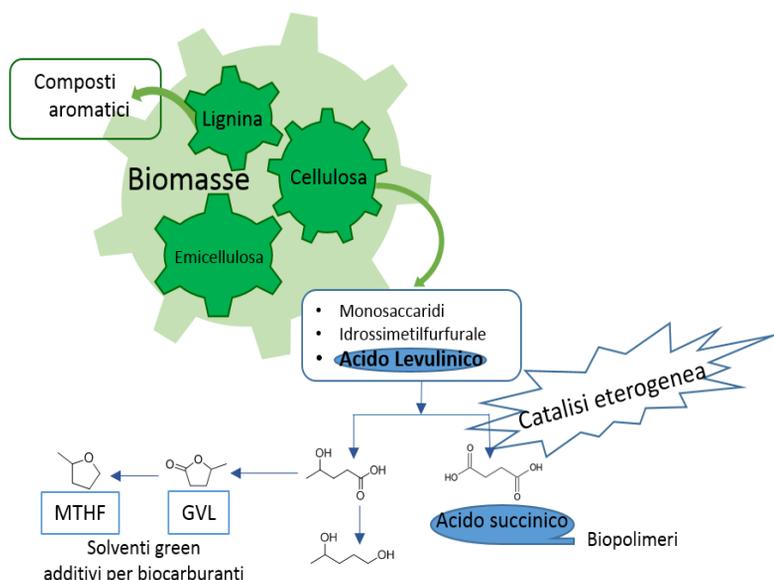
**Docente di riferimento:** D.ssa Silvia Tabasso E-mail: silvia.tabasso@unito.it; Tel. 011 670 5216

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

### Introduzione

La scarsa disponibilità delle risorse fossili unita al loro crescente costo ha stimolato, negli ultimi anni, la ricerca di fonti rinnovabili alternative per la produzione di energia e prodotti chimici per l'industria, nell'ottica di sviluppo di una bioraffineria. Le biomasse residuali lignocellulosiche sono una risorsa di crescente interesse in quanto non competono con le risorse dedicate all'alimentazione. Inoltre, la valorizzazione degli scarti con tecnologie non convenzionali rappresenta una soluzione sostenibile dal punto di vista ambientale ed economico al problema di trattamento dei rifiuti.



### Obiettivo

Sviluppo di nuovi protocolli sostenibili per l'ottenimento di prodotti ad alto valore aggiunto e intermedi per l'industria chimica a partire da biomasse residuali, che prevedano l'utilizzo di nuove tecnologie come le microonde. Nell'ottica di una maggiore sostenibilità, studio di sistemi catalitici eterogenei.

### Metodologie sperimentali

**Reazioni di conversione.** Ottimizzazione dei parametri di reazione e studio dei migliori sistemi catalitici su cellulosa commerciale in processi batch in microonde e/o ultrasuoni, e poi applicazione delle stesse condizioni su biomasse lignocellulosiche residuali.

**Caratterizzazione strutturale.** Intermedi e prodotti di conversione finali saranno caratterizzati strutturalmente mediante Risonanza Magnetica Nucleare, Spettrometria di Massa, Spettroscopia I.R.

**Scale-up.** Le condizioni ottimizzate in batch verranno adattate a processi in flusso, nell'ottica dello studio di un eventuale scale-up industriale

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Scienza e Tecnologia del Farmaco, Via Pietro Giuria 9

## Progetto di TESI: NUOVI SOLVENTI DERIVATI DA BIOMASSE PER LA SINTESI DI FINE CHEMICALS CON PROCESSI SOSTENIBILI

**Unità di ricerca:** D.ssa Silvia Tabasso

**Collaborazioni:** Prof. Giancarlo Cravotto, D.ssa Emanuela Calcio Gaudino

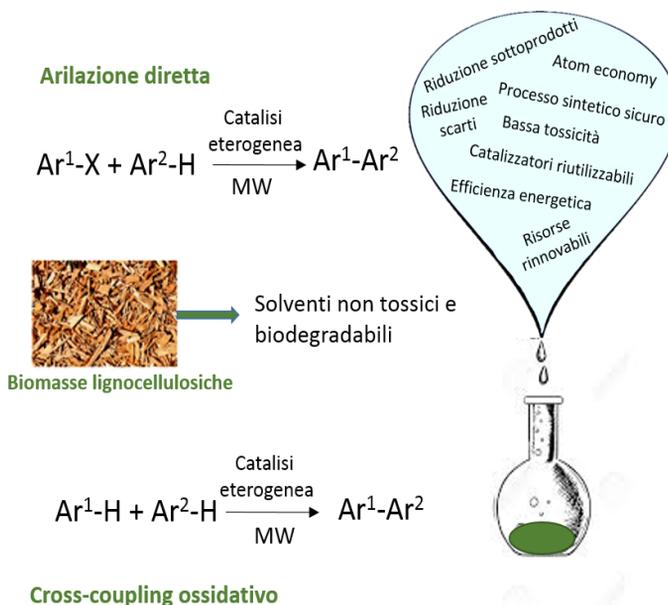
**Docente di riferimento:** D.ssa Silvia Tabasso E-mail: [silvia.tabasso@unito.it](mailto:silvia.tabasso@unito.it); Tel. 011 670 5216

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

### Introduzione

Sfruttare i principi della Green Chemistry significa ridurre o eliminare l'uso e la produzione delle sostanze pericolose durante tutte le fasi della lavorazione. I principi della Green Chemistry sottolineano l'importanza dell'uso di solventi e ausiliari innocui, e l'uso di materie prime rinnovabili, in processi ad alta efficienza energetica. Nei processi di sintesi, inoltre, l'uso di passaggi di modificazione temporanea dovrebbe essere evitato in quanto accompagnati da ulteriore consumo di reagenti e solventi.



### Obiettivo

Migliorare la sostenibilità dei processi di sintesi di fine chemicals attraverso:

- l'utilizzo di solventi non tossici derivati dalle biomasse, in alternativa ai tradizionali;
- una migliore efficienza energetica tramite l'utilizzo delle microonde, che permettono di ridurre i tempi di reazione e la formazione di sottoprodotti;
- sviluppo di protocolli di arilazione diretta come alternativa ecologicamente benigna alle metodologie tradizionali di cross-coupling;
- sviluppo/utilizzo di sistemi catalitici supportati che permettano la semplificazione delle procedure di purificazione del prodotto e di riciclo del catalizzatore stesso

### Metodologie sperimentali

Reazioni di arilazione diretta e cross-coupling ossidativo. Ottimizzazione dei parametri di reazione e studio dei migliori sistemi catalitici e solventi derivati da biomasse in reattori a microonde. Confronto con il metodo convenzionale.

Caratterizzazione strutturale. Intermedi e prodotti finali saranno caratterizzati strutturalmente mediante Risonanza Magnetica Nucleare, Spettrometria di Massa, Spettroscopia I.R.

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Scienza e Tecnologia del Farmaco, Via Pietro Giuria 9

## Progetto di TESI: PRETRATTAMENTO DI BIOMASSE PER LA PRODUZIONE DI BIOCARBURANTI E BIOPOLIMERI

**Unità di ricerca:** D.ssa Silvia Tabasso

**Collaborazioni:** Prof. Giancarlo Cravotto, D.ssa Emanuela Calcio Gaudino, Prof.ssa Francesca Bosco (POLITO)

**Docente di riferimento:** D.ssa Silvia Tabasso E-mail: [silvia.tabasso@unito.it](mailto:silvia.tabasso@unito.it); Tel. 011 670 5216

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

### Introduzione

Biomasse residuali lignocellulosiche possono essere utilizzate come materia prima per la produzione di biocarburanti di seconda generazione, o di biopolimeri. Entrambi i processi si basano su reazioni di fermentazione di monosaccaridi.

Le componenti principali delle biomasse lignocellulosiche sono la cellulosa, l'emicellulosa e la lignina. Per ottenere zuccheri fermentabili, allora, queste devono essere sottoposte a processi di pretrattamento ed idrolisi. Il pretrattamento della biomassa è di fondamentale importanza per disgregare la struttura della parete cellulare e separare la cellulosa e l'emicellulosa dalla lignina.

### Obiettivo

Studio di processi sostenibili per il pretrattamento e l'idrolisi di biomasse lignocellulosiche, per ottenere substrati da impiegare in processi biochimici per la sintesi di bioetanolo e biopolimeri. In particolare, verranno impiegate tecniche non convenzionali e solventi non tossici alternativi per il pretrattamento di biomasse lignocellulosiche, con lo scopo di:

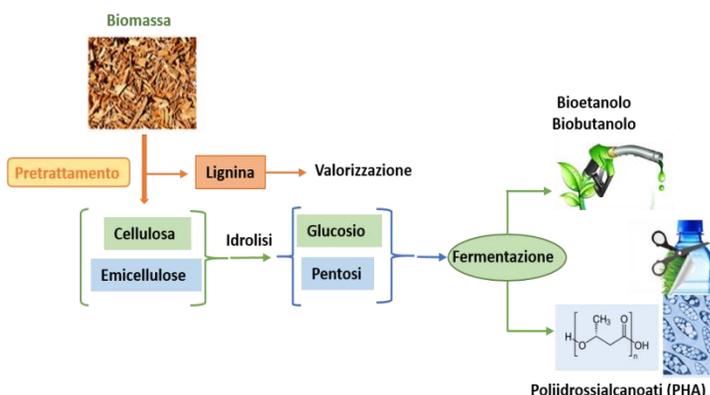
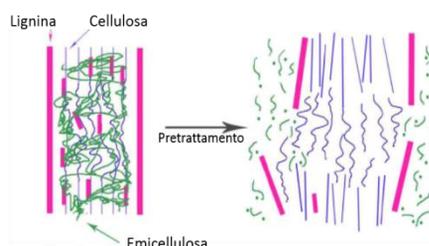
- individuare sistemi catalitici e additivi compatibili con i microorganismi utilizzati nella successiva fermentazione, da poter usare in processi selettivi mediati dalle microonde e dagli ultrasuoni.
- ottenere direttamente zuccheri monomerici oppure facilitare la successiva attività idrolitica enzimatica
- limitare la formazione di prodotti di degradazione inibitori di fermentazione.
- valorizzare anche le frazioni non fermentescibili (lignina)

### Metodologie sperimentali

I processi di pretrattamento e idrolisi in microonde ed ultrasuoni verranno valutati e ottimizzati sulla base delle conversioni, delle rese e della selettività, utilizzando le tecniche di risonanza magnetica nucleare (NMR) allo stato liquido e solido, la spettrometria di massa, anche accoppiata alla gascromatografia e alla cromatografia liquida (GC-MS, LC-MS), la spettroscopia infrarossa e la microscopia elettronica a scansione. Verrà valutato il potere antiossidante della lignina, una volta separata dalla cellulosa, nell'ottica di una sua valorizzazione. Una volta ottenuti i biopolimeri, questi verranno caratterizzati, sia con strumenti a disposizione del gruppo, sia avvalendosi di collaborazioni esterne.

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Scienza e Tecnologia del Farmaco, Via Pietro Giuria 9



## Progetto di TESI: NUOVI SENSIBILIZZATORI PER LA TERAPIA FOTODINAMICA (PDT)

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Nadia Barbero

**Collaborazioni:** Prof.ssa Sonja Visentin (MBC UniTo), Dr. Loredana Serpe (DSTF UniTo)

**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

### Introduzione

Per PDT si intende la somministrazione di un farmaco fotosensibile (PS) ad un paziente il cui tumore viene poi trattato con luce dell'appropriata lunghezza d'onda. In presenza di ossigeno, il PS porta alla generazione di specie citotossiche ed alla conseguente morte delle cellule e dei tessuti interessati. La PDT offre un'alternativa sia come trattamento a sé stante, sia nei casi in cui le cellule tumorali sviluppino immunoresistenza ai farmaci chemioterapici e diventi necessario un metodo di cura alternativo.

### Obiettivo

Sintetizzare nuovi sensibilizzatori (PS) appartenenti alla famiglia dei coloranti polimetinici (squaraine, cianine, croconine) capaci di assorbire la radiazione NIR, la quale ha maggiore potere penetrante e quindi consente di fotoeccitare il sensibilizzatore nelle zone più interne del tessuto ove il tumore mostra la massima vascolarizzazione.

### Metodologie sperimentali

**Sintesi.** Intermedi e sensibilizzatori finali saranno sintetizzati per via tradizionale e mediante irraggiamento con microonde.

**Caratterizzazione strutturale.** Intermedi e sensibilizzatori finali saranno caratterizzato strutturalmente mediante Risonanza Magnetica, Spettrometria di Massa e Spettroscopia I.R.

**Proprietà fotosensibilizzanti.** La capacità di generare ossigeno singoletto sarà testata mediante spettroscopia UV-visibile studiando la degradazione di un probe indotta dall'ossigeno singoletto.

**Tossicità.** Sarà testata la tossicità al buio dei fotosensibilizzatori utilizzando linee cellulari sane scelte come modello di tessuti normali.

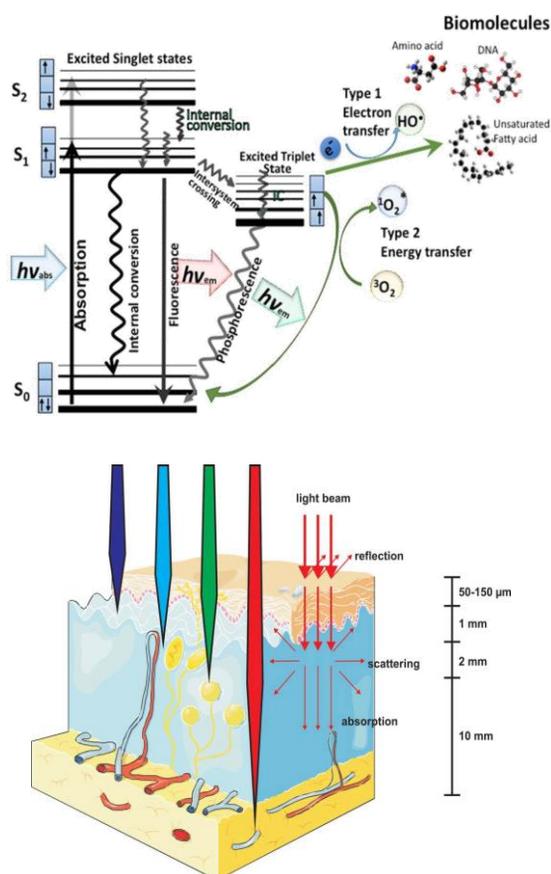
**Test PDT.** Saranno condotti test di terapia fotodinamica sui sensibilizzatori che risulteranno non tossici al buio.

### Riferimenti

- Eur. J. Med. Chem. (2016), 113, 187-197.
- J. Photochem. Photobiol. B: Biol. (2016), 158, 16-22.

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Quarello .



**Progetto di TESI: COLORANTI ED INTERMEDI PER LA MODIFICAZIONE/FUNZIONALIZZAZIONE DI NANOMATERIALI (SILICA NPS, CNT, GOLD NANOPARTICLES, HALLOYSITE, MOF) PER DIAGNOSTICA E DRUG DELIVERY**

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Nadia Barbero

**Collaborazioni:** Prof.ssa Sonja Visentin (MBC UniTo), Prof. Gianmario Martra (Chimica)

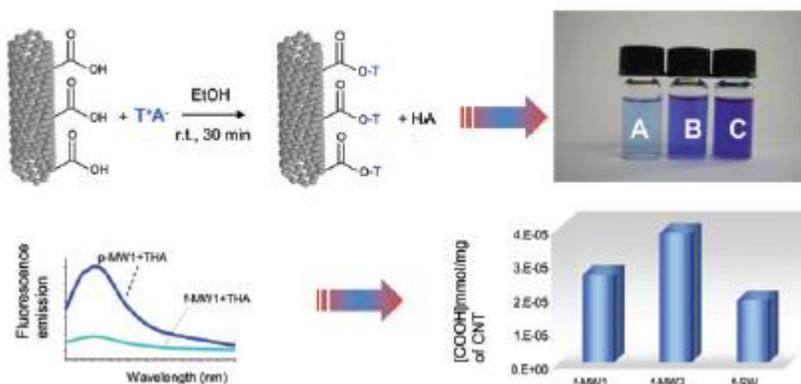
**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

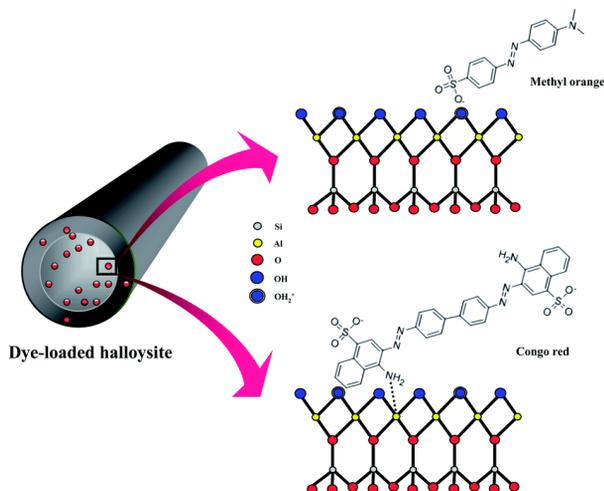
### Introduzione

I nanomateriali esibiscono peculiari proprietà chimiche, fisiche e ottiche che dipendono dalle loro dimensioni e che sono differenti da quelle presenti nei materiali di dimensioni convenzionali (cosiddetti bulk materials).



### Obiettivo

Sintesi di opportuni nuovi coloranti appartenenti alla famiglia dei coloranti polimetinici (squaraine, cianine).  
Funzionalizzazione dei nanomateriali ed infine studio della loro interazione con proteine e/o farmaci.



### Riferimenti

- *Analyst*, (2015), 140(16), 5754-5763.
- *Carbon*, (2010), 48 (12), 3391-3398.
- *Chem. Commun.*, (2010), 46 (9), 1443-1445.

### Metodologie sperimentali

**Sintesi.** Intermedi e sensibilizzatori finali saranno sintetizzati per via tradizionale e mediante irraggiamento con microonde.

**Caratterizzazione strutturale.** Intermedi e sensibilizzatori finali saranno caratterizzati strutturalmente mediante Risonanza Magnetica, Spettrometria di Massa e Spettroscopia I.R.

**Caratterizzazione spettroscopica.** Caratterizzazione fotochimica dei coloranti mediante spettroscopia UV-Vis, fluorescenza statica, time-resolved ed anisotropia.

**Caratterizzazione dei complessi nanomateriale/colorante** mediante SEM, TEM, TGA, AFM, Raman, FT-IR.

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Quarello

## Progetto di TESI: INTERAZIONE FARMACO-PROTEINA E PROTEINA-PROTEINA

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Nadia Barbero

**Collaborazioni:** Prof.ssa Sonja Visentin (MBC UniTo)

**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

### Introduzione

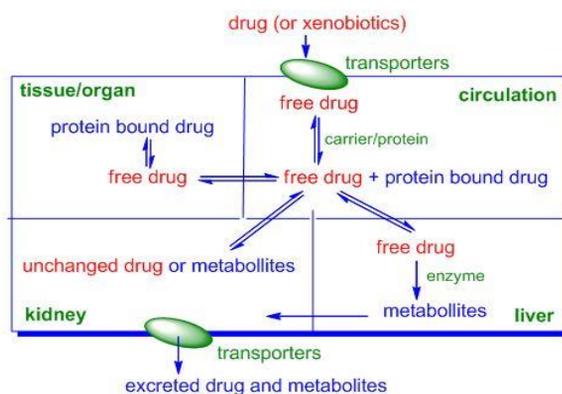
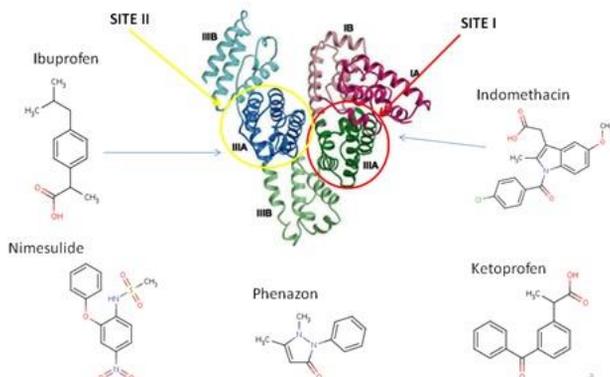
I farmaci ad uso sistemico, in seguito alla somministrazione, entrano nel circolo sanguigno, raggiungono gli organi bersaglio ed esplicano la propria azione farmacologica. All'interno dell'organismo il farmaco segue quindi un percorso ben definito, che può essere suddiviso in quattro tappe: assorbimento, distribuzione, metabolismo ed escrezione (ADME).

I farmaci nel plasma possono presentarsi in due forme: liberi o legati. Dopo essere stati assorbiti, i primi giungono negli organi bersaglio, mentre gli altri si legano reversibilmente alle proteine plasmatiche, perdendo quindi l'attività farmacologica. Il legame con le proteine influisce quindi sulla farmacocinetica e sulla farmacodinamica. Nel primo caso perché condiziona la velocità di distribuzione e di eliminazione, dato che solo il farmaco libero è in grado di diffondere; nel secondo caso perché solo la quota non legata può svolgere la propria funzione una volta raggiunto il sito d'azione.

### Obiettivo

Determinazione delle costanti di interazione tra farmaci e proteine di trasporto o coinvolte in particolari patologie o studio dell'interazione proteina-proteina per indagare alcuni pathway cellulari.

Studio dell'interazione farmaco-proteina o proteina-proteina mediante spettroscopia UV-Vis, fluorescenza statica, time-resolved e anisotropia.



### Metodologie sperimentali

Studio delle interazioni. Studio dal punto di vista termodinamico mediante spettroscopia UV-Vis e fluorescenza per determinare le costanti termodinamiche di associazione e dissociazione delle interazioni.

Studio dal punto di vista cinetico mediante fluorescenza stopped-flow per determinare le costanti cinetiche di associazione e dissociazione delle interazioni.

### Riferimenti

- Bioorg. Med. Chem. (2015), 23 (20), 6581-6586.
- J. Photochem. Photobiol. A: Chem. (2015), 299, 38-43.

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Quarellò.

## Progetto di TESI: SINTESI DI TENSOATTIVI GEMINI FLUORURATI PER TERAPIA GENICA

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Pierluigi Quagliotto, Dr. Nadia Barbero

**Collaborazioni:** Prof.ssa Emilia Fiscaro (Università di Parma)

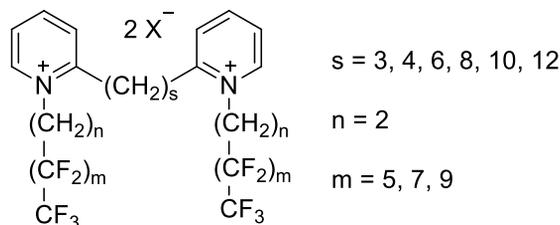
**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

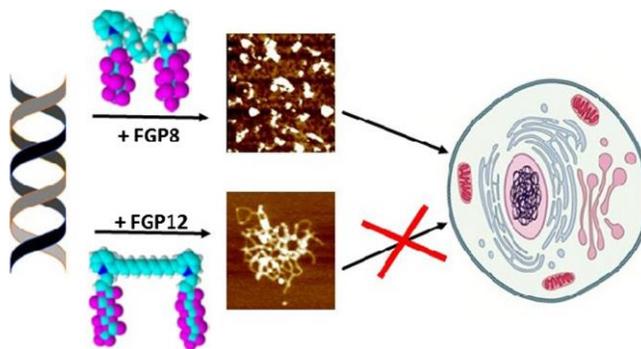
### Introduzione

I tensioattivi cationici sono predisposti a trasferire geni in una cellula. E' possibile modulare le caratteristiche dei tensioattivi gemini modificando lo spaziatore e la lunghezza di catena.



### Obiettivo

Sintetizzare tensioattivi fluorurati gemini in grado di trasferire un gene ad una cellula in modo efficiente. Partendo da un composto attivo della serie, si cercano composti più attivi tramite modifiche strutturali.



### Metodologie sperimentali

Sintesi. Sintesi dei tensioattivi in ambiente anidro.

Caratterizzazione strutturale. Intermedi e sensibilizzatori finali saranno caratterizzati strutturalmente mediante spettroscopia NMR e spettrometria di massa.

Prove biologiche. Le prove biologiche sono effettuate presso l'Università di Parma.

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Giuria 7.

## Progetto di TESI: APPROCCI GREEN PER LA SINTESI ORGANICA

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Pierluigi Quagliotto, Dr. Nadia Barbero

**Collaborazioni:** Prof.ssa Emilia Fiscaro (Università di Parma)

**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

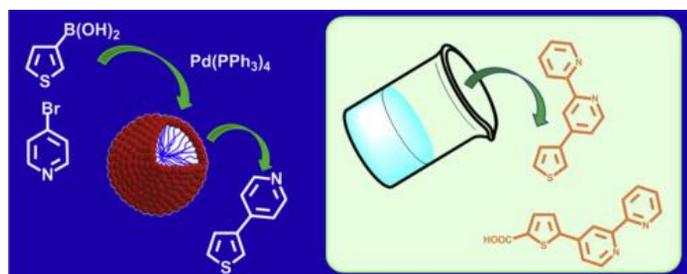
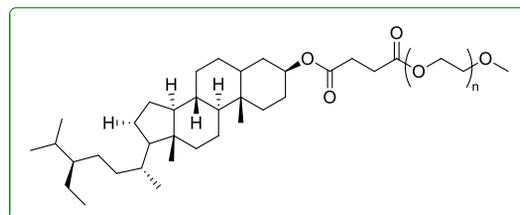
### Introduzione

L'etica della chimica richiede di mutare la sintesi dei composti per il mondo moderno, riducendo l'impatto ambientale. Negli ultimi tre anni, reazioni complesse sono state condotte in ambiente acquoso e a temperatura ambiente. In tali condizioni è necessario riprogettare completamente la chimica per un solvente "nuovo".

### Obiettivo

Sintetizzare composti organici di interesse applicativo, usando H<sub>2</sub>O come solvente.

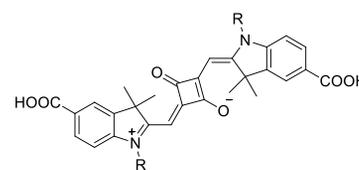
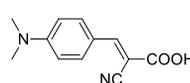
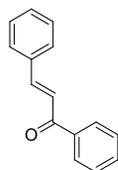
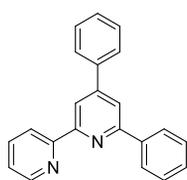
L'uso di tensioattivi, di sintesi e "green", è una considerevole innovazione nella sintesi organica. L'utilizzo di tensioattivi "Green" e che formano micelle di grosse dimensioni consente di condurre le reazioni a temperatura ambiente.



### Reazioni

**Condensazione Aldolica, Michael, Knoevenagel, Krohnke, Suzuki-Miyaura, Sonogashira**

**Targets: composti e materiali per sistemi fotovoltaici**



### Metodologie sperimentali

**Sintesi.** Sintesi di tensioattivi e loro applicazione alla sintesi in solvente acquoso di intermedi e composti per scopo applicativo.

**Caratterizzazione strutturale.** UV, IR, NMR, Massa.

**Disegno Sperimentale.**

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Giuria 7.

### Riferimenti:

Lipshutz et al. *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 2806-2816.

Quagliotto et al. *Dyes & Pigments* **2017**, *137*, 468-479.

Lipshutz, B.H. et al. *Green Chem.*, **2014**, *16*, 3660-3679.

Klumphu, P. et al. *J. Org. Chem.* **2014**, *79*, 888-900.

## **Progetto di TESI: DAL MATERIALE AL DISPOSITIVO: PERCORSO DI CONVERSIONE/STOCCAGGIO ENERGETICO**

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Pierluigi Quagliotto, Dr. Nadia Barbero

**Collaborazioni:** Politecnico di Torino, EPFL di Losanna (CH)

**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

### **Celle solari DSC acquose**

- *Sviluppo di coloranti*
- *Sviluppo di elettroliti polimerici e biopolimerici*
- *Design of experiments*
- *Elettrochimica applicata*



### **Nuovi sistemi di accumulo dell'energia (batterie)**



- *Sviluppo di materiali elettrodici tramite riconversione di scarti agroalimentari*
- *Sviluppo di elettroliti polimerici e biopolimerici*
- *Assemblaggio e testing elettrochimico di celle a base litio e sodio da laboratorio e a livello pre-industriale*

#### **Metodologie sperimentali**

- *Sintesi organica*
- *Caratterizzazione elettrochimica*
- *Preparazione di materiali ibridi*
- *Caratterizzazione elettrica*
- *Sviluppo di formulazioni*

#### **Riferimenti**

*(risultato di alcuni lavori di tesi)*

- *Chem. Sci.* 7 (2016) 4880
- *Green. Chem.*, 10.1039/C6GC02625G
- *Energy Tech.*, 10.1002/ente.201600285
- *ChemSusChem* 8 (2015) 3668
- *Scientific Reports* 6 (2016) 19892
- *Carbon* 107 (2016) 811

#### **Altre informazioni**

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Quarellino 15A e Via Giuria 7, nonché presso i laboratori del Politecnico.

**Progetto di TESI: EMETTITORI PER LEC E FOSFORI PER WHLED**  
**(ILLUMINAZIONE SOSTENIBILE)**

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Nadia Barbero

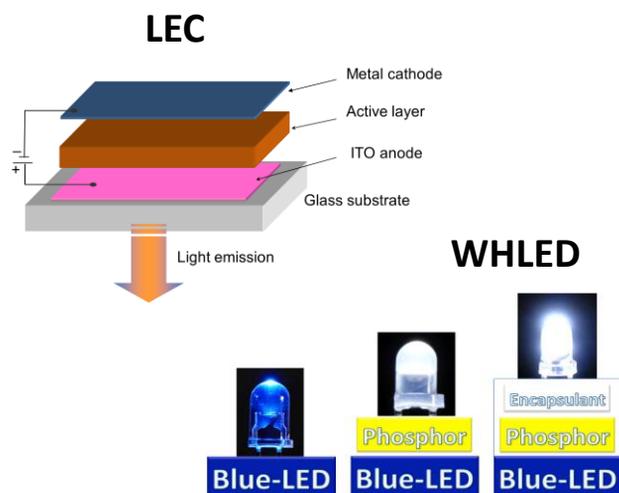
**Collaborazioni:** Dr. R. Costa (Madrid) e Prof. Civalleri e Bonino (Chimica)

**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

- Sintesi di leganti e sistemi organometallici
- Sintesi di Metal Organic Frameworks
- Caratterizzazione chimico-fisica
- In caso di stage all'estero (**Dr. R. Costa**) preparazione e caratterizzazione del dispositivo
- In caso di stage in azienda: compatibilizzazione con sistemi polimerici



**Riferimenti**

- Dalton Trans. 2016, **45**, 8984-8993
- NIS Colloquium 6-7 Ottobre 2016

**Altre informazioni**

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Giuria 7.

**Progetto di TESI: DOWN SHIFTERS IBRIDI**  
**(SISTEMI FOTOVOLTAICI)**

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Nadia Barbero

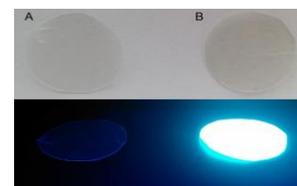
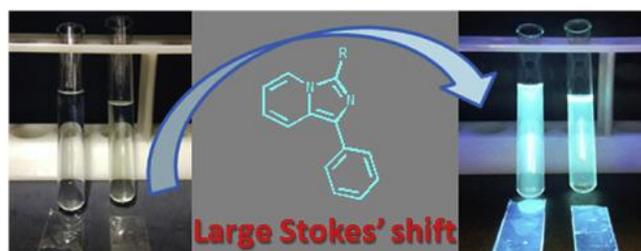
**Collaborazioni:** Prof. M. Milanese, UNIUPO e dr. A. Menozzi (SE srl)

**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

- Sintesi di molecole organiche a basso costo con assorbimento nell'UV e specifiche caratteristiche di emissione (alti Stokes Shift e rese quantiche)
- Utilizzo come additivi in resine poliuretaniche (possibile stage in azienda)
- Caratterizzazione chimico-fisica del polimero fotoattivo



**Riferimenti**

- ChemSusChem 9 (2016) 1279
- Dyes Pigments 137 (2016) 162

## Progetto di TESI: SINTESI DI INTERMEDI E LEGANTI PER LA RIDUZIONE DELLA CO<sub>2</sub>

**Unità di ricerca:** Prof. Guido Viscardi, Prof.ssa Claudia Barolo, Dr. Pierluigi Quagliotto, Dr. Nadia Barbero

**Collaborazioni:** Prof. Nervi (Chimica)

**Docente di riferimento:** Prof. Guido Viscardi E-mail: guido.viscardi@unito.it; Tel. 011 670 7598

**Disponibile dal:** 01/02/2017

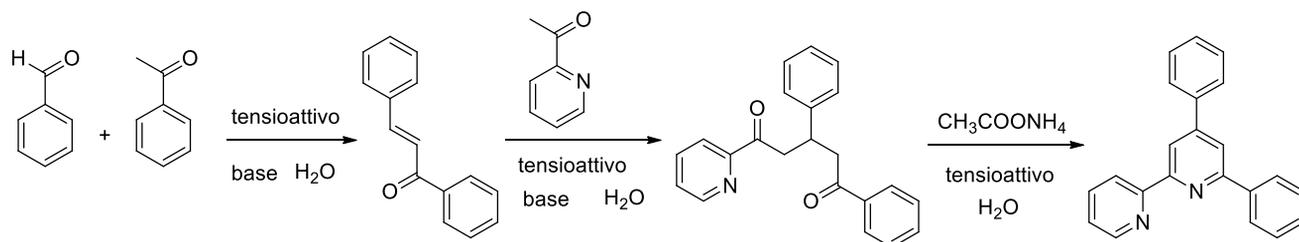
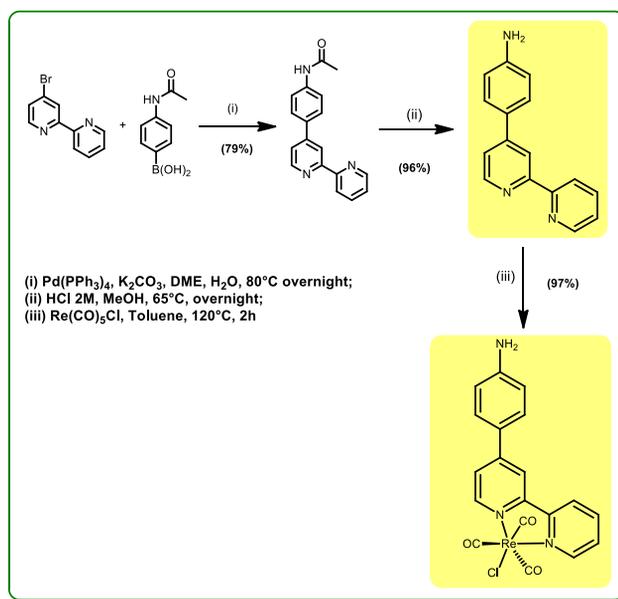
**Tipologia:** Tesi Sperimentale/Tesi Compilativa

### Introduzione

I complessi di Re, Fe, Mn ed altri metalli con leganti organici sono in grado di promuovere la riduzione elettrochimica della CO<sub>2</sub>. Lo scopo finale del lavoro è quello di ottenere elevate attività e selettività. L'utilizzo dell'energia solare per condurre la riduzione permette di produrre i Solar Fuels.

### Obiettivo

Sintesi di leganti organici, loro complessi e funzionalizzazione di elettrodi di carbonio vetroso. Determinazione dell'attività verso la riduzione della CO<sub>2</sub>. Sviluppo di reazioni di tipo "Green" per l'ottenimento dei prodotti di interesse.



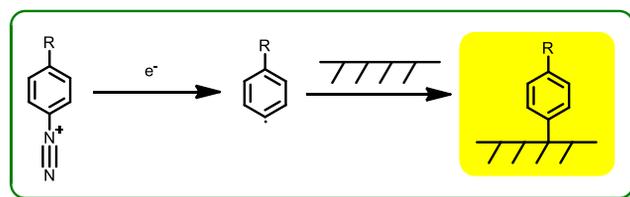
### Metodologie sperimentali

Sintesi: intermedi, leganti e complessi metallici.

Caratterizzazione: UV, IR, NMR, Massa.

Funzionalizzazione elettrochimica degli elettrodi.

Prove di riduzione elettrochimica della CO<sub>2</sub>.



### Riferimenti

- Quagliotto, P. et al., *Dyes and Pigments* **2017**, 137, 468-479.
- Sun, C.; Nervi C. et al. *Dalton Trans.* **2016**, 45, 14678-14688.
- Berardi, S. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 7501-7519.

### Altre informazioni

La tesi prevede attività sperimentale che sarà condotta presso i laboratori del Dipartimento di Chimica di via Giuria 7.