

## **SCIENZE DELLE SEPARAZIONI**

Le scienze delle separazioni trovano ampio uso in tutte le scienze chimiche e biologiche e in molte aree dell'ingegneria. Le scienze delle separazioni riguardano lo studio di processi fondamentali e di materiali per la separazione e la successiva determinazione di molecole specifiche, generalmente da matrici complesse di diversa natura (ambientale, alimentare, biologica, farmaceutica, industriale, etc.). Le scienze delle separazioni consentono di incrementare la nostra conoscenza sulla composizione di materiali e su processi fondamentali nel campo chimico, biologico, ambientale e tecnologico.

### *OBIETTIVI*

Lo scopo della ricerca è quello di studiare gli aspetti fondamentali, sia da un punto di vista sperimentale che teorico, dei fenomeni chimico-fisici che governano la separazione come, ad esempio, i processi di adsorbimento su materiali micro- e nano-porosi, il riconoscimento chirale e molecolare, gli effetti di eterogeneità superficiale, i trasferimenti di massa in mezzi porosi, etc. Questa conoscenza è necessaria non solo per la comprensione dei meccanismi di separazione ma anche per il miglioramento tecnologico di materiali adsorbenti (ad esempio per nuove fase stazionarie per cromatografia o per la preparazione del campione), la messa a punto e l'ottimizzazione di nuove metodiche analitiche altamente efficienti, selettive e sostenibili (determinazione di composti chirali, contaminanti emergenti, nanoparticelle, composti con attività biologica, terre rare, etc.) e, infine, lo sviluppo o l'implementazione di nuovi sistemi di separazione avanzati (sistemi accoppiati, metodi reattivi in flusso, etc.)

### *STRUMENTAZIONE E METODI*

Il gruppo di scienze delle separazioni è ben equipaggiato con strumentazione d'avanguardia nel campo delle scienze delle separazioni quali cromatografi liquidi (analitici e nano) per HPLC e UHPLC, LC-MS/MS, LC-ICP/MS, GC-MS, CE (rivelazione UV-Vis e fluorescenza), Field Flow Fractionation.

### *DISCIPLINE COINVOLTE*

Scienza delle Separazioni; Chimica Analitica Ambientale; Chimica degli Alimenti; Chimica Organica; Chimica Farmaceutica.

### *GRUPPO DI LAVORO*

Prof. A. Cavazzini, Prof. L. Pasti, Dr. N. Marchetti, Prof. M. C. Pietrogrande, Dr. C. Contado, Prof. M. Remelli, Dr. V. Costa

### *COLLABORAZIONI*

Il gruppo di ricerca si avvale sia di collaborazioni interne al Dipartimento e all'Ateneo (Scienze Fisiche e della Terra), sia di numerose collaborazioni nazionali (Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica, università del Piemonte Orientale, Dipartimento di Chimica Università di Roma La Sapienza, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Università di Roma La Sapienza) ed internazionali (A. Galarneau, Istitute Montpellier, France; A. Felinger, University of Pécs, Hungary; G. Desmet, University of Brussels, Belgium; N. Delunay Paristech, Colloïdes et Sciences Analytiques, Paris, France).

## **ANALISI DIMENSIONALE E COMPOSIZIONALE DI MATERIALI NANO- E MICROPARTICELLATI UTILIZZATI IN PRODOTTI ALIMENTARI, PER LA CURA PERSONALE ED IN FORMULAZIONI FARMACEUTICHE**

I nanomateriali, ovvero quei materiali che contengono particelle con dimensioni inferiori ai 100 nm in numero maggiore del 50%, sono realtà in molti settori; l'industria cosmetica, farmaceutica ed alimentare ne testimoniano solo alcuni.

Poiché le proprietà fisiche e chimiche dei nanomateriali spesso sono diverse da quelle dagli stessi materiali con dimensioni maggiori, questi richiedono una speciale valutazione del rischio per assicurarsi che siano sicuri sia per gli esseri umani che per l'ambiente.

La presenza di nanoparticelle negli alimenti e nei prodotti di uso quotidiano, rispetto a quella in tanti altri prodotti presenti sul mercato, desta particolare preoccupazione nell'opinione pubblica poiché esse possono penetrare all'interno del nostro organismo, causando effetti ad oggi solo parzialmente conosciuti.

Questa linea di ricerca si pone quindi come obiettivi lo sviluppo di metodi per la caratterizzazione, rivelazione e quantificazione di nanoparticelle all'interno di prodotti di uso quotidiano.

### ***OBIETTIVI***

- Sviluppo di metodi per la separazione e/o estrazione e pre-concentrazione di materiale particellato da matrici complesse.
- Sviluppo di metodi separativi, basati sulle tecniche di frazionamento in campo-flusso (Field Flow Fractionation) per ricavare parametri chimico-fisici (massa, dimensioni, densità) di nano- e micro-particelle in prodotti alimentari e per la cura personale.
- Caratterizzazione fisico-chimica di nano e microparticelle utilizzate come "drug-delivery systems".

### ***STRUMENTAZIONE E METODI***

Per il raggiungimento degli obiettivi di questa ricerca si utilizzano diverse tecniche strumentali come quali il frazionamento in campo flusso (FFF), la spettroscopia di emissione (AES) e di assorbimento atomico (AAS), la cromatografia liquida (HPLC) e la microscopia elettronica.

### ***DISCIPLINE COINVOLTE***

Scienza delle Separazioni; Chimica degli Alimenti; Tecnica Farmaceutica.

### ***GRUPPO DI LAVORO***

Dr. C. Contado, Prof. A. Cavazzini, Prof. L. Pasti, Prof. M. Remelli, Prof. M. C. Pietrogrande, Dr. N. Marchetti, A. Pagnoni

### ***COLLABORAZIONI***

Il gruppo di ricerca si avvale di collaborazioni interne ad UniFe (Prof. A. Dalpiaz, Prof. R. Cortesi, Dr. E. Esposito) e di collaborazioni internazionali (Università di Namur - Belgio, Università di Bordeaux – Francia, Postnova – Germania).

## **SVILUPPO, OTTIMIZZAZIONE E VALIDAZIONE DI METODOLOGIE ANALITICHE PER LA DETERMINAZIONE DI COMPOSTI BIOATTIVI IN MATRICI ALIMENTARI, PREPARATI FARMACEUTICI E MATRICI BIOLOGICHE**

Questo tema di ricerca si propone di caratterizzare nel modo più completo possibile matrici vegetali, come prodotti agro-alimentari anche di origine locale, con finalità sia immediate, come quelle di valorizzare tali prodotti dal punto di vista nutrizionale e funzionale (determinazione di composti bioattivi dalle riconosciute proprietà per la salute umana, ad es. antiossidanti), sia a lungo termine, come quelle di promuovere maggior biodiversità dei prodotti agro-alimentari, di contribuire all'individuazione di prodotti tipici e di qualità, di incentivare l'impiego di componenti alimentari biologicamente attivi attraverso una loro corretta identificazione chimica ed individuazione della loro funzione ed impiego anche in prodotti alimentari derivati e lavorati. Lo studio di composti bioattivi viene anche svolto sia su matrici di origine farmaceutica o cosmetica (ad es. per studiarne la stabilità), sia su campioni biologici (ad es. per studiarne la farmacocinetica).

### *OBIETTIVI*

Messa a punto metodologie analitiche selettive, affidabili ed estremamente sensibili per la determinazione di composti bioattivi in diverse matrici complesse, come quelle alimentari, preparati farmaceutici e di origine biologica. Da un lato le tecniche separative, identificative e di quantificazione sono funzionali alla corretta determinazione di molecole bioattive come ad esempio in esperimenti di farmacocinetica dove si valuta la stabilità dei composti e la loro distribuzione in diversi comparti di organismi modello (tessuti di organi, plasma, liquido cerebrospinale, ecc.), dall'altro devono fornire sufficienti capacità identificative per poter caratterizzare matrici alimentari di origine vegetale e/o individuare metaboliti di interesse sia in alimenti che in matrici biologiche.

### *STRUMENTAZIONE E METODI*

Per il raggiungimento degli obiettivi di questa ricerca si utilizzano diverse tecniche analitiche utili sia al corretto trattamento dei campioni per l'estrazione di composti bioattivi, sia alla loro caratterizzazione strutturale e determinazione quantitativa. Le principali tecniche impiegate sono: estrazione liquido-liquido eventualmente accompagnata da idrolisi enzimatiche, estrazione in fase solida (SPE), gascromatografia accoppiata alla spettrometria di massa (GC-MS), e cromatografia liquida accoppiata alla spettrometria di massa tandem (LC-MS/MS). Per quanto riguarda le tecniche di ionizzazione impiegate in LC-MS/MS si dispone di due sorgenti per la ionizzazione a pressione atmosferica: electrospray (ESI) e ionizzazione chimica (APCI).

### *DISCIPLINE COINVOLTE*

Scienza delle Separazioni; Chimica Analitica; Chimica degli Alimenti; Chimica Organica; Chimica Farmaceutica.

### *GRUPPO DI LAVORO*

Dr. N. Marchetti, Prof. A. Cavazzini, Prof. L. Pasti, Prof. V. Brandolini, Dr. A. Maietti, Prof. M. Remelli, Prof. M. C. Pietrogrande, Dr. C. Contado, Dr. V. Costa, Dr. P. Tedeschi.

### *COLLABORAZIONI*

Il gruppo di ricerca si avvale sia di collaborazioni interne al Dipartimento e all'Ateneo (Prof. A. Dalpiaz, Prof. S. Scalia), sia di collaborazioni nazionali con aziende del territorio e gruppi di ricerca internazionali (Spagna, Ungheria, Francia).

## **SVILUPPO, CARATTERIZZAZIONE E APPLICAZIONE DI MATERIALI ADSORBENTI PER LA DECONTAMINAZIONE AMBIENTALE E IL RECUPERO DI MATERIE PRIME SECONDE**

Questa linea di ricerca si pone i seguenti scopi: da una parte di studiare materiali nano e mesoporosi nei confronti delle loro caratteristiche adsorbenti verso numerosi inquinanti nelle acque (contaminanti emergenti e inquinanti organici persistenti), dall'altra di sviluppare nuovi materiali adsorbenti per applicazioni di cromatografia liquida e/o per lo sviluppo di sistemi (anche on-line) di estrazione in fase solida e di preconcentrazione per analisi HPLC in campo ambientale, farmaceutico e alimentare.

### *OBIETTIVI*

Studio e comprensione dei meccanismi di interazione tra molecole organiche e fase stazionaria sia per separazioni chirali che achirali. Risoluzione di specifiche problematiche separative attraverso lo sviluppo e la caratterizzazione di nuovi materiali adsorbenti da utilizzarsi per applicazioni analitiche (di separazione e/o di estrazione e pre-concentrazione). Questi studi possono avere interessanti ricadute in ambito ambientale e agro-alimentare tramite lo sviluppo di nuove tecniche di decontaminazione delle acque e il recupero di materie prime seconde da materiali di scarto.

### *STRUMENTAZIONE E METODI*

Per il raggiungimento degli obiettivi di questa ricerca si utilizzano diverse tecniche strumentali come ad esempio la cromatografia liquida (HPLC), la gascromatografia (GC), l'elettroforesi capillare (CE), la spettroscopia di emissione (AES) e di assorbimento atomico (AAS) e il frazionamento in campo flusso (FFF). Nel gruppo di ricerca di chimica analitica sono presenti strumentazioni avanzate che accoppiano tecniche separative a metodi di rivelazione estremamente sensibili e/o selettivi (quali ad es. HPLC-MS, GC-MS, ICP-MS, ecc.). Inoltre si utilizzano tecniche di trattamento del campione quali l'estrazione in fase solida (SPE) e la micro estrazione in fase solida (SPME).

### *DISCIPLINE COINVOLTE*

Scienza delle Separazioni; Chimica Analitica Ambientale; Chimica degli Alimenti; Chimica Organica

### *GRUPPO DI LAVORO*

Prof. L. Pasti, Prof. A. Cavazzini, Dr. N. Marchetti, Prof. M. C. Pietrogrande, Dr. C. Contado, Dr. V. Costa, A. Pagnoni

### *COLLABORAZIONI*

Il gruppo di ricerca si avvale sia di collaborazioni interne al Dipartimento e all'Ateneo (Scienze Fisiche e della Terra), sia di collaborazioni nazionali (Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica, Università del Piemonte Orientale) ed internazionali (A. Galarneau, Istitute Montpellier, France).

## **MONITORAGGIO DELLA QUALITA' DELL'ARIA: CARATTERIZZAZIONE CHIMICA DELL'AEROSOL ATMOSFERICO**

È importante conoscere le caratteristiche chimiche dell'atmosfera, in quanto è stato evidenziato che esse possono essere associate a danni per la salute umana, in particolare la quantità e la composizione del particolato disperso nell'atmosfera (PM). Lo studio della qualità dell'aria è in particolare dedicato sia a sostanze che sono riconosciute tossiche per l'ambiente e l'uomo, sia a specifiche molecole che sono state riconosciute come marker molecolari in grado di fornire informazioni sulle sorgenti di emissione e sui processi che avvengono nell'atmosfera. Questi studi hanno interessanti ricadute in ambito ambientale e tossicologico perché sono fondamentali per individuare le fonti dell'inquinamento atmosferico ed individuare le possibili strategie per ridurre l'entità e l'impatto sulla salute umana.

### *OBIETTIVI*

Studiare la composizione chimica del particolato atmosferico, sia metalli che composti organici; mettere a punto metodi analitici per l'analisi di composti presenti in tracce nell'aria; sviluppare procedure analitiche adatte al monitoraggio ambientale; applicare i metodi sviluppati a campagne di monitoraggio ambientale per studiare la qualità dell'aria; elaborare le informazioni ed interpretare i risultati ottenuti da campagne di monitoraggio ambientale.

### *STRUMENTAZIONE E METODI*

Per il raggiungimento degli obiettivi di questa ricerca si utilizzano diverse tecniche strumentali come la gascromatografia (GC), cromatografia liquida (HPLC), la spettroscopia di emissione (AES) e di assorbimento atomico (AAS). Nel gruppo di ricerca di chimica analitica sono presenti strumentazioni avanzate che accoppiano tecniche separative a metodi di rivelazione estremamente sensibili e/o selettivi (quali ad es. HPLC-MS, GC-MS, ICP-MS, ecc.). Inoltre si utilizzano tecniche di trattamento del campione quali l'estrazione in fase solida (SPE) e la micro estrazione in fase solida (SPME).

### *DISCIPLINE COINVOLTE*

Chimica Analitica; Chimica Ambientale; Scienza delle Separazioni.

### *GRUPPO DI LAVORO*

Prof. M. C. Pietrogrande, Prof. A. Cavazzini, Prof. L. Pasti, Prof. M. Remelli, Dr. N. Marchetti, Dr. C. Contado, A. Pagnoni.

### *COLLABORAZIONI*

Il gruppo di ricerca si avvale sia di collaborazioni nazionali (Istituto ISAC-CNR Bologna, ARPAE Emilia Romagna, ARPA Lombardia) ed internazionali (Department of Analytical Chemistry, University of Helsinki, Finland; Department of Analytical Chemistry, University of Santiago de Compostela, Spain).

## **EQUILIBRI DI COMPLESSO-FORMAZIONE IN SOLUZIONE TRA METALLI E LEGANTI DI INTERESSE BIOLOGICO E/O FARMACOLOGICO**

Molti metalli sono coinvolti nei processi biologici che garantiscono il sostentamento della vita animale e vegetale. Tra questi i cosiddetti metalli "minori", presenti in tracce ma facenti parte di molecole fondamentali per la vita, quali metallo-enzimi e metallo-proteine. La formazione di tali complessi è regolata da un gran numero di fattori ambientali tra i quali anche la competizione di altri leganti e ioni metallici. È importante quindi conoscere il comportamento di questi sistemi in condizioni dinamiche, quali quelle che si verificano in soluzione, nei fluidi biologici.

### *OBIETTIVI*

I principali obiettivi di questa linea di ricerca sono i seguenti: a) misura delle costanti acido/base dei leganti considerati; b) definizione del modello di speciazione relativo ai complessi formati tra i leganti e i metalli oggetto di indagine; c) calcolo di diagrammi di distribuzione e di competizione; d) studio della struttura in soluzione dei principali complessi formati. Tale schema di indagine è stato recentemente applicato sia nel campo degli equilibri metallo-peptide (usati come modelli per i complessi metallo-proteina) che nello studio di potenziali farmaci per terapia chelante (impiegati nella terapia di intossicazioni da metalli) nonché di complessi macro-chelati come possibili candidati come mezzi di contrasto in diagnostica per immagini.

### *STRUMENTAZIONE E METODI*

Il metodo largamente più utilizzato per lo studio di equilibri in soluzione che coinvolgono molecole con proprietà acido-base è la potenziometria con elettrodo a vetro. In casi particolari possono essere utilizzati elettrodi di altro tipo, ad es. elettrodi reversibili al metallo. Il laboratorio dispone di due titolatori automatici, composti ciascuno da una microburetta motorizzata ed un pHmetro di precisione gestiti da calcolatore. Al fine di completare la caratterizzazione termodinamica degli equilibri in soluzione, il laboratorio dispone di un microcalorimetro isoperbolico a titolazione (Tronac, mod. 450). Per ottenere poi informazioni sulla struttura delle specie formate vengono utilizzate diverse tecniche spettroscopiche, tra le quali la spettrofotometria UV-Vis, la spettrofotometria di dicroismo circolare, le spettroscopie EPR ed NMR. Tra le tecniche disponibili in Dipartimento, vengono pure largamente utilizzate: la spettrometria ESI-MS, per confermare la stechiometria delle specie in soluzione, e la diffrazione ai raggi X per ottenere la struttura allo stato solido di cristalli dei complessi. In collaborazione col Dipartimento di Scienze della Vita e Biotecnologie vengono eseguiti test di attività biologica in vitro dei complessi sintetizzati.

### *DISCIPLINE COINVOLTE*

Chimica analitica, Chimica fisica, Chimica bioinorganica, Chimica organica, Biochimica.

### *GRUPPO DI LAVORO*

Prof. M. Remelli, Prof. A. Cavazzini, Dr. C. Contado, Dr. N. Marchetti, A. Pagnoni, Prof. L. Pasti, Prof. M. C. Pietrogrande.

### *COLLABORAZIONI*

Intra moenia: Prof. Valerio Bertolasi, Prof. Remo Guerrini, Prof. Riccardo Gavioli. Extra moenia: Prof. H. Kozlowski (Università di Wroclaw, PL), Prof. D. Valensin (Università di Siena), Prof. M.A. Zoroddu (Università di Sassari), Prof. G. Crisponi (Università di Cagliari), Dr. M. Tegoni (Università di Parma).