



PIANO ANNUALE 2005

Progettazione Molecolare

Elenco dei Progetti:

	pag.
Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici).....	3
Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto.....	33
Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche.....	53
Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche e magnetiche.....	67
Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce.....	83
Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery.....	101



Dipartimento Progettazione Molecolare

Descrizione obiettivi generali

Tale area tematica, che ha una forte connotazione di applicazione dei risultati, di sviluppi tecnologici e industriali, si caratterizza per i seguenti obiettivi:

- la modellistica teorica e la progettazione sperimentale di nuovi sistemi molecolari, supramolecolari e macromolecolari con specifiche funzionalità;
- la sintesi e caratterizzazione, strutturale e funzionale, di molecole, supramolecole e macromolecole e studio del loro comportamento funzionale come tali o come sistemi organizzati per ottenere proprietà cooperative;
- lo studio sperimentale delle applicazioni innovative dei nuovi nanosistemi a base molecolare in vari dispositivi.

Elenco dei progetti

L'attività di tale area è articolata nei seguenti 6 progetti:

1. Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
2. Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
3. Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
4. Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche e magnetiche
5. Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
6. Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery

Istituti di prevista afferenza

Istituto di Biostrutture e Bioimmagini
Istituto di Cristallografia
Istituto di Chimica Biomolecolare
Istituto di Chimica dei Composti Organometallici
Istituto di Chimica Inorganica e delle Superfici
Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare
Istituto di Chimica e Tecnologia dei Polimeri
Istituto di Metodologie Chimiche
Istituto per i Materiali Compositi e Biomedici
Istituto per lo Studio delle Macromolecole.
Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati
Istituto per la Sintesi Organica e la Fotoreattività
Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari
Istituto per la Tecnologia delle Membrane.

Istituti partecipanti

Istituto di Neuroscienze
Istituto di Tecnologie Biomediche

Principali collaborazioni

E' stato sviluppato un accordo quadro con IINSTM, che rappresenta 44 università italiane, che prevede una sistematica collaborazione tra dette università con l'inserimento di ricercatori e professori universitari nella programmazione e nello svolgimento delle attività del CNR nel settore della progettazione molecolare. Importante è anche l'accordo stipulato con Federchimica per lo sviluppo delle PMI e gli Accordi in corso di sviluppo con grandi imprese multinazionali come Mapei.

Sintesi dei risultati attesi

(da revisionare a cura dei comitati ordinatori)

L'impostazione strategica del Programma Dipartimentale, basata sulla trasversalità dei campi di indagine al fine di individuare e meglio conoscere le interazioni tra fenomeni e sistemi diversi, permetterà il raggiungimento di traguardi scientifici e tecnologici nei settori di maggior impatto sulla moderna società, quali: *la salute, l'ambiente, la mobilità, l'informazione e la*



comunicazione, l'alimentazione, la sicurezza e la difesa. In particolare, la crescita qualitativa ed organizzativa della rete scientifica di settore consentirà di armonizzare i programmi degli Istituti focalizzandone gli obiettivi con il conseguenziale raggiungimento della massa critica, dell'efficienza operativa e della razionalizzazione delle strutture per settori omogenei.

L'incontro tra domanda e offerta di conoscenza, favorendo il trasferimento dei risultati delle ricerche in forme utili alla Società con il superamento dei limiti di debolezza del sistema istituzionale e di quello industriale, permetterà di raggiungere una soddisfacente posizione competitiva a livello internazionale della comunità scientifica italiana ed in particolare dell'attuale CNR.

Risorse complessive del triennio

Le risorse da impegnare per questa area tematica nel triennio sono:

anno	risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
	A	B	C	D = A + C
2005	76,19	18,06	5,31	81,50
2006	74,47	19,42	5,31	79,78
2007	72,41	20,78	5,31	77,72

valori in milioni di euro



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)

Descrizione obiettivi generali

Sviluppare nuove molecole e metodologie innovative di progettazione e caratterizzazione nei settori terapeutico, diagnostico, agroalimentare.

numero commesse	numero moduli	personale equivalente tempo pieno	
		ricercatori	totale
16	12	127	192

Istituti esecutori

Tecnologie Biomediche
Biostrutture e Bioimmagini
Chimica Biomolecolare
Chimica dei Composti Organo-Metallici
Chimica del Riconoscimento Molecolare
Chimica Inorganica e delle Superfici
Scienze e Tecnologie Molecolari
Sintesi Organica e la Fotoreattività

Sintesi dei risultati attesi

(da revisionare a cura dei comitati ordinatori)

Conoscenza di nuove molecole e metodologie innovative di progettazione e conseguente ricaduta nei settori terapeutico, diagnostico ed agroalimentare. In particolare esatta determinazione del potenziale tecnologico sia nell'industria farmaceutica sia nell'industria alimentare, nonché valorizzazione delle biomasse derivanti dalla produzione di idrogeno.

Risorse complessive del triennio

Le risorse da impegnare per questo progetto nel triennio sono:

anno	risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
	A	B	C	D = A + C
2005	20,52	3,29	0,74	21,26
2006	20,06	3,54	0,74	20,79
2007	19,50	3,79	0,74	20,24

valori in milioni di euro



Biocatalizzatori

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica del riconoscimento molecolare (ICRM)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Sergio Riva

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 13 di cui Ricercatori: 8

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Paola Anna Botti	III	Walter Panzeri	V	Stefano Serra	III
Giacomo Carrea	I	Piero Pasta	III	Donatella Varinelli	VI
Gabriella Cussigh	V	Fantoni Giuseppe	III	Francesca	III
Domenicangelo Freri	VI	Andrea Pedrocchi		Zambianchi	
Daniela Monti	III	Sergio Riva	II		
Gianluca Ottolina	III	Francesco Secundo	III		

Tem

Tematiche di ricerca

Studio della specificità di substrato di varie flavinomonooxygenasi. Ossidazione di idrossistilbeni, ammine e glicosidi naturali catalizzate da laccasi. Ossido-riduzioni regio e stereoselettive catalizzate da idrossisteroidedehidrogenasi. Individuazione, caratterizzazione e ottimizzazione dell'uso di idrolasi e trasferasi. Loro utilizzo per la modifica regioselettiva di composti naturali e per la risoluzione cinetica di racemati, precursori di aminoacidi non naturali e di aromi e fragranze.

Stato dell'arte

Con il termine "biocatalisi" si intende lo sfruttamento delle peculiari proprietà degli enzimi o microorganismi per la soluzione di problemi nei settori della chimica fine e farmaceutica, dell'agrochimica ed in campo alimentare e ambientale. La biocatalisi è una componente essenziale della biotecnologia "white" o industriale ritenuta dalla Commissione Europea, dal CEFIC e dalla Biotech Industries Association una componente fondamentale per lo sviluppo in Europa di una chimica sostenibile.

Azioni

Attività in corso

L'attività riguarda lo studio e l'utilizzo di enzimi appartenenti a ognuna delle sei classi enzimatiche, e spazia dal loro isolamento, caratterizzazione e clonaggio, all'ottimizzazione delle condizioni di reazione in acqua e in solventi organici, all'utilizzo di enzimi isolati o di cellule per la preparazione di sintoni chirali, la modifica selettiva di composti naturali complessi, l'ottenimento di aromi e fragranze otticamente attivi nonché allo scaling-up delle reazioni di interesse.

Azioni da svolgere e punti critici

I RESIDUI DELLA COMMESSA SONO STATI CALCOLATI DALLA MASSA SPENDIBILE AL 14-12-2004 (EURO 456278) E NON AL 21-11-2004 (EURO 418566). Si ritiene che gli obiettivi proposti siano realistici tenendo conto delle competenze esistenti e del numero di ricercatori impegnati. Un punto critico è legato alla strumentazione di laboratorio, in alcuni casi ormai obsoleta, che necessiterebbe di miglioramento sia come upgrading che come sostituzione o nuove acquisizioni(GC, HPLC, spettrofotometri UV-VS).



Collaborazioni e committenti

Collaborazioni nazionali sono in corso con ricercatori dell'Università e del Politecnico di Milano, e con le Ditte Resindion, Prodotti Chimici e Alimentari, Indena e InterCos. Inoltre questa commessa è inserita in un network di collaborazioni internazionali ufficializzate dal CNR e dal Ministero degli Esteri (con Austria, Rep. Ceca, Portogallo) e dalla CE (UCL Londra, CNRS Marsiglia, Università di Vienna, Università di Groningen, Network of Excellence "MARBEF", Azione COST).

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale che intendiamo perseguire è lo sviluppo di nuovi processi, basati sull'impiego di biocatalizzatori, che siano di interesse per l'industria chimica, farmaceutica, alimentare, manifatturiera e cosmetica e che siano efficienti, sicuri ed economicamente ed ambientalmente vantaggiosi. Le necessarie competenze di chimica organica, microbiologia, biologia molecolare, "biochemical engineering", biochimica ed enzimologia sono ben rappresentate nel nostro gruppo di ricerca.

Risultati attesi nell'anno

I seguenti risultati sono attesi nel 2005: Purificazione e clonaggio di una galattosidasi da *Talaromyces flavus*. Nuovi mutanti di una fosfolipasi D da *Streptomyces* espressa in *E. coli*. Sviluppo di preparati enzimatici (anche immobilizzati) con maggiore attività e stabilità per applicazioni sintetiche e risoluzioni cinetiche, in particolare per ottenere enantiomeri di molecole correlate a note fragranze. Sviluppo di tecniche per separare, su larga scala, i prodotti delle biotrasformazioni.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare (ICB)

Luogo di svolgimento attività: Pozzuoli (NA)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
3.581	190	17	3.598

importi in migliaia di euro



Peptidi bioattivi: sintesi e proprietà

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare (ICB)
Sede svolgimento attività:	Padova (PD)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Gianfranco Borin

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca

Le tematiche di ricerca della Commessa riguardano la progettazione, la sintesi chimica, la purificazione, la caratterizzazione chimico-fisica e gli studi delle relazioni struttura-funzione di peptidi biologicamente attivi. In particolare: 1) lo studio di enzimi ad attività tirosinchinasica implicati nella proliferazione cellulare; 2) lo sviluppo di peptidi ad attività internalizzante per il rilascio di farmaci; 3) gli studi di processi neurodegenerativi; 4) antibiotici e foldameri peptidici. ¹

Stato dell'arte

In generale l'impiego di diagnostici e farmaci peptidici è limitato dalle loro sfavorevoli proprietà chimico-fisiche che ne prevengono la permeazione attraverso la membrana cellulare, e dalla loro scarsa resistenza alla degradazione enzimatica: si tratta quindi di progettare la sintesi di nuovi peptidi che siano dotati di aumentata attività farmacologica e selettività verso i bersagli scelti, ma che nello stesso tempo siano in grado di superare le sopracitate limitazioni al loro uso in vivo.

Azioni

Attività in corso

In ragione del loro ampio spettro di proprietà biologiche i peptidi bioattivi, naturali o sintetici e loro analoghi mirati caratterizzati da una maggiore efficacia, selettività ed effetti collaterali sempre minori, sono potenzialmente utilizzabili a scopi diagnostici e/o terapeutici in una serie di patologie, quali il cancro, le malattie sensibili agli antibiotici ed antifungini, i disordini neuronali e quelli del sistema immunitario e le malattie cardiovascolari e di origine virale.

Azioni da svolgere e punti critici

Obiettivi sono la progettazione e la sintesi di sequenze peptidiche, in grado di contrastare infezioni batteriche, malattie degenerative e l'invasione tumorale, con aumentata attività farmacologica e selettività verso i bersagli citati, con maggiore permeabilità alla membrana cellulare, mediante modifiche chimiche e coniugazione con agenti permeabilizzanti, e migliore resistenza alla degradazione enzimatica, attraverso l'incorporazione di building blocks diversi dagli alfa-amminoacidi proteici.

Collaborazioni e committenti

I Ricercatori partecipanti sono attualmente impegnati nella sintesi di nuovi peptidi bioattivi anche modificati nella loro sequenza naturale. Gli effetti di queste modifiche sulla loro struttura tridimensionale e sulle loro proprietà di interazione con i bersagli fisiologici sono oggetto di analisi conformazionale in soluzione, mediante NMR, CD, IR ed allo stato cristallino. I saggi di attività enzimatica e farmacologica sono condotti nel quadro delle collaborazioni in atto in calce riportate.

Finalità

Obiettivi

¹DSM Research, Geleen, The Netherlands; SIRCOB, UMR CNRS 8086, Uni. Versailles, France; Dep. de Química Organica, Uni. Zaragoza, Spain; Dep. Biochemistry, McMaster Uni., Hamilton,



Canada; Institute of Chemical Kinetics and Combustion, Novosibirsk, Russian Fed.; Lab. of Neurosciences, Baltimore, MD, USA; Dip. di Chimica Biologica, Uni. Padova; Diamond Light Source, Ltd., Didcot, U.K.; Dip. di Biochimica, Uni. Trieste; Institute of Biochemistry, Uni. Hospital of the RWTH Aachen, Aachen, Germany.¹

Risultati attesi nell'anno

Individuazione delle proteine target, raccolta dati; sintesi mediante tecniche tradizionali o sviluppo di libraries di probes molecolari per le proteine in esame, di peptidi inibitori e/o substrati di chinasi e fosfatasi, di coniugati peptide internalizzante-drug e di analoghi di peptidi antibiotici; sviluppo di metodiche spettroscopiche per gli studi delle relazioni struttura-funzione, delle interazioni peptidi-proteina e peptidi-membrana; proprietà conformazionali di amminoacidi non proteici.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
256	0	0	256

importi in migliaia di euro



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Basi molecolari nelle patologie correlate al disordine conformazionale proteico.

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di biostrutture e bioimmagini (IBB)
Sede svolgimento attività:	Valverde (CT)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Giuseppe Pappalardo

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Elenco dei partecipanti

Temi

Tematiche di ricerca:

Le attività previste sono: Ottimizzazione dei protocolli di sintesi per le sequenze peptidiche/peptidomimetiche con capacità fibrillogeniche. Identificazione dei parametri strutturali e conformazionali responsabili dell'attività fibrillogenica e determinazione del ruolo degli ioni metallici nel processo di aggregazione. Valutazione dell'attività citotossica dei peptidici e dei loro complessi metallici. Valutazione e ottimizzazione dell'attività antifibrillogenica di nuovi sistemi bioconiugati

Stato dell'arte

La proposta di commessa risulta fattibile in quanto sono presenti competenze consolidate nell'ambito della progettazione e nella sintesi di sistemi di interesse biologico e con esperienze nella caratterizzazione spettroscopica (NMR, CD, UV, MS) e termodinamica (potenziometria, calorimetria diretta e DSC) di sistemi biologici complessi. Tuttavia un punto critico è da rilevare nell'inadeguatezza delle risorse finanziarie e nella limitata disponibilità di personale.

Azioni

Attività in corso

'La presente proposta di ricerca si inserisce nel contesto delle Neuroscienze e si propone di curare gli aspetti molecolari associati con il "mis-folding" di proteine responsabili di malattie neurodegenerative e di individuare peculiari fenomeni patologici indotti da ioni metallici. La realizzazione di nuove molecole antifibrillogeniche per il trattamento di queste patologie è un ulteriore obiettivo da perseguire. Tale argomento è stato inserito fra le proposte di ricerca del VI programma quadro.'

Azioni da svolgere e punti critici

Individuare i meccanismi coinvolti nelle transizioni conformazionali di peptidi fibrillogenici in differenti condizioni sperimentali e valutazione dell'influenza degli ioni metallici sulla conformazione della catena polipeptidica. Studio calorimetrico (DSC) in membrane lipidiche artificiali in presenza ed in assenza di ioni metallici. Design e sintesi di nuove molecole antifibrillogeniche nonché screening di attività biologica. Le competenze utilizzate saranno di tipo chimico-biologico

Collaborazioni e committenti

Le attività riguardano la sintesi e caratterizzazione strutturale di frammenti peptidici derivati da proteine fibrillogeniche e loro interazione con ioni metallici. L'attività di ricerca comprende anche la progettazione e sintesi di nuovi peptidi/peptidomimetici e loro bioconiugati capaci di antagonizzare gli effetti patologici di proteine strutturalmente alterate o di ridurre il processo di amiloidogenesi utili per il trattamento delle malattie neurodegenerative o delle amiloidosi in genere.



Finalità

Obiettivi

La proposta di commessa necessita di un approccio multidisciplinare con competenze sia nel campo chimico che biologico. L'argomento della presente commessa ha permesso di costituire un gruppo composto da chimici, biologi, farmacologi e medici con il comune obiettivo di studiare un problema di elevata rilevanza scientifica e di grande impatto sociale. Esistono inoltre consolidate collaborazioni con Università nazionali ed internazionali nonché con realtà industriali presenti nel territorio

Risultati attesi nell'anno

La speciazione dei complessi metallo-peptidi in aggiunta alla determinazione dell'effetto degli ioni metallici sulla stabilità conformazionale delle proteine studiate e dei frammenti peptidici correlati, consentirà, in una prima fase, la validazione dei dati sperimentali per la razionalizzazione dei meccanismi molecolari coinvolti nel processo di aggregazione. Ciò permetterà, in un secondo tempo, di ottimizzare l'efficacia in vitro dei nuovi composti anti-fibrillogenici ed antiossidanti.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare (ICB)

Luogo di svolgimento attività: Sassari (SS)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
461	183	0	461

importi in migliaia di euro



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Progettazione su base strutturale di molecole di rilevanza terapeutica

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di biostrutture e bioimmagini (IBB)
Sede svolgimento attività:	Napoli (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Luigi Vitagliano

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Elenco dei partecipanti

Temi

Tematiche di ricerca

Nell'ambito della presente commessa si utilizzerà l'approccio della progettazione molecolare su base strutturale per ottenere nuovi composti che possano essere impiegati nel trattamento di gravi patologie umane. In particolare, ci si propone di progettare e caratterizzare molecole con attività antibiotica, antitumorale e antiobesità. A tal fine, sono previste caratterizzazioni strutturali e funzionali di sistemi proteici e nucleo-proteici di molecole di interesse terapeutico

Stato dell'arte

Per il raggiungimento degli obiettivi sarà necessario mettere a frutto competenze nei campi della biologia molecolare, della chimica e della biologia strutturale, della chimica computazionale e della biologia cellulare. I progetti previsti nell'ambito della macrolinea sono fattibili viste le competenze e le infrastrutture presenti nella commessa. Gli aspetti critici dello sviluppo dei progetti riguardano principalmente i flussi finanziari e la possibilità di disporre di nuove unità di personale.

Azioni

Attività in corso

La progettazione su base strutturale di biomolecole dotate di efficacia terapeutica rappresenta un campo di notevole interesse farmaceutico. I notevoli costi connessi al processo di individuazione di nuovi farmaci ha indotto le industrie farmaceutiche a ricorrere a strutture esterne per la fase di progettazione molecolare. Esiste quindi una forte domanda di ricerca di base ed applicata, in parte soddisfatta dalle piccole Biotech, che da alcuni anni investe anche il mondo della ricerca pubblica.

Azioni da svolgere e punti critici

Obiettivo principale di questa commessa è progettare molecole di interesse terapeutico utilizzando informazioni derivanti dalla caratterizzazione strutturale dei sistemi bersaglio. Per ciascun sistema considerato ci si propone di ottenere preliminarmente informazioni strutturali dettagliate. Sulla base di questi risultati si procederà alla progettazione ed alla caratterizzazione di nuovi composti.

Collaborazioni e committenti

La progettazione di molecole di interesse farmaceutico prevede l'acquisizione di informazioni strutturali, la progettazione di molecole in grado di modulare l'attività dei sistemi bersaglio e la verifica sperimentale dell'efficacia delle molecole progettate. I progetti della commessa si trovano in diverse fasi di sviluppo. In alcuni casi si sta procedendo all'acquisizione delle informazioni strutturali, mentre, in altri, sono già in corso caratterizzazioni di molecole di interesse terapeutico



Finalità

Obiettivi

Le attività di ricerca saranno sviluppate in stretta collaborazione con numerose istituzioni scientifiche nazionali ed internazionali (North Dakota State University, (USA), Tampere University (Finlandia), Max Plank Institute (Germania), EMBL Amburgo (Germania) e Weizmann Institute (Israele), CNRS Strasburgo (Francia), e Nancy University (Francia)). In alcune delle tematiche di ricerca sono coinvolti partner industriali (PRIMM, Pfizer, INBIOS, e Tecnogen)

Risultati attesi nell'anno

Le diverse linee di ricerca che confluiscono nella commessa sono in fasi di sviluppo differenziate. Per la maggior parte dei progetti i risultati attesi per l'anno in corso riguardano la caratterizzazione strutturale dei sistemi bersaglio di molecole di interesse terapeutico. Per altri progetti si prevede di poter già caratterizzare la molecole progettate.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
367	119	0	367

importi in migliaia di euro



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche - Sviluppo dei repertori molecolari per applicazioni in diagnostica farmaceutica

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	stituto di biostrutture e bioimmagini (IBB)
Sede svolgimento attività:	Napoli (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Menotti Ruvo
Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno):	di cui Ricercatori:

Elenco dei partecipanti

Temi

Tematiche di ricerca

Design di nuove molecole, Sintesi di nuove molecole di natura peptidica e peptidomimetica, design sintesi e caratterizzazione di librerie di composti con tecniche di sintesi parallela e combinatoriale. Screening di repertori molecolari sintetici e naturali. Preparazione e purificazione di proteine ricombinanti. Messa a punto ed esecuzione di saggi di screening in vitro con tecnologia High Throughput Screening (HTS). Sviluppo di metodi di spettrometria di massa. Nuovi traccianti per diagnostica.

Stato dell'arte

Realizzazione di ulteriori repertori molecolari sintetici e di prodotti naturali; creazione di databases e sviluppo di metodiche, protocolli e softwares dedicati per la gestione dei repertori e la gestione automatizzata dei saggi HTS. Punti critici: acquisizione di ulteriori risorse economiche e di personale tecnico specializzato, acquisizione di nuova strumentazione dedicata, acquisizione di nuovo spazio dedicato alla preparazione delle librerie, alla conservazione ed allo screening."

Azioni

Attività in corso

La preparazione di repertori molecolari, la loro caratterizzazione con metodi di spettrometria di massa e la selezione con tecniche HTS di nuovi composti modulanti l'azione di targets coinvolti in malattie regolandone il funzionamento e funzionando da traccianti per la loro localizzazione o per la loro determinazione quantitativa rappresentano uno dei metodi di ricerca ricerca biomedica più attuali ed efficienti per lo sviluppo di nuove molecole di importanza farmaceutica e diagnostica.

Azioni da svolgere e punti critici

Obiettivi: Identificazione di nuove molecole ad azione antidiabetica, antitumorale e studio dei meccanismi molecolari associati ai targets studiati. Sviluppo di nuovi traccianti per scopi diagnostici. Comprensione di meccanismi molecolari alla base delle patologie studiate.

Collaborazioni e committenti

Realizzazione di repertori molecolari a base peptidomimetica ed organica per lo screening di nuove molecole ad attività farmacologica per il trattamento del diabete di tipo II (agenti sul sistema PED/PLD1), per la selezione di antagonisti della proteina Cripto e della proteina PlGF per lo sviluppo di antitumorali, diagnostici e traccianti. Caratterizzazione strutturale delle proteine bersaglio inclusa la spettrometria di massa per il design mirato di nuove molecole e librerie "focused".



Finalità

Obiettivi

Istituto per l'Endocrinologia e l'Oncologia (IEOS) del CNR di Napoli, Istituto di Genetica e Biofisica (IGB) del CNR di Napoli, Università Federico II di Napoli, Società Tecnogen, Società Sigma-Tau, Società Thromb- X di Leuven (Belgio). Università di Salerno, Università di Catania, ITB-Istituto di Tecnologie Biomediche di Padova e Milano, CONSORZIO INTERUNIVERSITARIO DI RICERCA IN CHIMICA DEI METALLI NEI SISTEMI BIOLOGICI, CONSORZIO INTERUNIV. ISTITUTO NAZIONALE BIOSTRUTTURE E BIOSISTEMI (INBB).

Risultati attesi nell'anno

Realizzazione di alcuni repertori molecolari e dei databases per la loro gestione. Acquisizione di macchine per sintesi chimica parallela e combinatoriale, acquisizione di macchine per saggi di screening HTS, messa a punto di saggi per lo screening di repertori molecolari, acquisizione di know-how e training sulle tecniche specifiche di HTS.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)

Luogo di svolgimento attività: Pisa (PI)

Istituto esecutore: Istituto di chimica inorganica e delle superfici (ICIS)

Luogo di svolgimento attività: Padova (PD)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
749	322	0	749

importi in migliaia di euro



Progettazione molecolare di proprietà biochimiche – TARGETING MOLECOLARE

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di biostrutture e bioimmagini (IBB)
Sede svolgimento attività:	Napoli (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Michele Saviano

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 5 di cui Ricercatori: 4

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Rita Berisio	III	Enrico Bucci	III	Luana Barone	VII
Katia D'ambrosio	III	Luca Domenico D'andrea	III	Tiziana Campagna	VI
Giuseppina De Simone	III	Gabriella De Vita	VI	Nina Alayne Dathan	III
Antonietta Gargiulo	VIII	Giulia Grasso	III	Luciana Esposito	III
Diego La Mendola	III	Rosaria Lauceri	III	Valentina Ferrari Bravo	VII
Simona Maria Monti	III	Paola Occorsio	VI	Roberto Improta	III
Emilia Maria Pedone	III	Giosue' Piccolo	VII	Ornella Maglio	III
Giuseppe Perretta	VI	Michele Saviano	II	Giuseppe Pappalardo	III
Anna Maria Santoro	III	Luigi Vitagliano	II	Menotti Ruvo	II
Giovanni Tabbi	III	Leopoldo Zona	VI	Giosue' Sorrentino	VI
Laura Zaccaro	III	Luana Barone	VII	Rosamaria Vitale	III
Maurizio Amendola	VI	Tiziana Campagna	VI		

Temi

Tematiche di ricerca

Le attività da svolgere nell'ambito dei diversi progetti in collaborazione con differenti partners sia industriali sia pubblici prevedono allo stato attuale lo studio di diversi sistemi biologici complessi (AKAP121, NFkb, Sp1, Myd88) e lo sviluppo di applicazioni software di analisi in grado di fornire una interfaccia utente per l'utilizzo in modo integrato e trasparente di programmi e database nel campo della bioinformatica.

Stato dell'arte

La macrolinea "Targeting Molecolare" svolta presso la Sezione di Ricerca di Biostrutture dell'Istituto si inserisce nell'ambito dell'Asse 2- Sostegno della ricerca orientata allo sviluppo di tecnologie chiave abilitanti a carattere multisettoriale, dell'Azione "Forte sostegno pubblico a programmi di ricerca "mission oriented", capaci di ampliare la base di conoscenza e di sviluppare nuove tecnologie emergenti come le biotecnologie e la post-genomica del PNR 2002.

Azioni

Attività in corso

Sono in corso studi su diversi sistemi legati sia a patologie tumorali sia al targeting a specifiche strutture cellulari. In particolare sono in corso studi su sistemi oligonucleotidici modificati da utilizzare in applicazioni decoy, il rational design di peptidomimetici per la veicolazione a ben determinati compartimenti cellulari e per l'inibizione dei processi di dimerizzazione in Death domains implicati in patologie tumorali e per ottenere composti ad attività antinfiammatoria.

Azioni da svolgere e punti critici

Tutti i progetti descritti risultano al momento fattibili per le competenze ed infrastrutture al momento disponibili. Inoltre la multidisciplinarietà dei progetti garantisce anche la possibilità di sinergie utili allo sviluppo di prodotti nell'ambito della farmaceutica e della diagnostica. Per



quanto riguarda i punti di criticità, essi riguardano essenzialmente i flussi di risorse finanziarie e la possibilità di disporre di personale ricercatore per svolgere le attività descritte.

Collaborazioni e committenti

Le attività da svolgere nell'ambito dei diversi progetti sono in collaborazione con differenti partners sia industriali (Sigma Tau, IBM sud Tecnogen etc) sia pubblici (IEOS CNR, diversi Dipartimenti dell'Università di Napoli "Federico II", CIRPEB, Dipartimento di Biochimica e Biologia Molecolare Università di Ferrara, Centro di Risonanze Magnetiche (CERM) - Università di Firenze etc).

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo principale è lo sviluppo di nuove molecole a diversa complessità come farmaci o come mezzi di contrasto e traccianti ad alta specificità che coniughino un'elevata selettività verso il target molecolare con una bassa tossicità legata al ridotto dosaggio. Per il raggiungimento degli obiettivi si propone un approccio multidisciplinare con l'integrazione di competenze trasversali (progettazione, sintesi e caratterizzazione di nuove molecole, sviluppo di metodologie bioinformatiche).

Risultati attesi nell'anno

I risultati attesi nell'ambito della macrolinea sono i seguenti: Sviluppo di nuove molecole altamente specifici verso target recettoriali overespressi in tumori da utilizzare sia come mezzi di contrasto in tecniche di diagnostiche per imaging radiotraccianti in medicina nucleare, che come agenti terapeutici radiomarcanti a bassa tossicità legata ad un ridotto dosaggio. Incremento del know-how nelle nuove tecniche di riconoscimento e delivery di molecole o carrier per tecniche di diagnosi.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
700	533	84	784

importi in migliaia di euro



Proteomica e Metabolomica

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche (ITB)
Sede svolgimento attività:	Segrate (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Medicina
Responsabile indicato:	Pietro Luigi Mauri

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Tem

Tematiche di ricerca:

La presente commessa di ricerca si occupa di sviluppare tecnologie innovative e di applicarle allo studio di problematiche biomediche nell'ambito della salute. In particolare, si applicano le più recenti metodologie proteomiche e metabolomiche al fine di rendere possibile lo studio di sistemi biologici complessi mediante approccio integrato tra diverse metodologie. ¹

Stato dell'arte

Sviluppo di metodologie innovative e loro applicazione allo studio di malattie e farmaci. Le infrastrutture analitiche e le competenze sono di primissimo livello ma dimensionate per piccoli gruppi di ricerca e progetti di portata relativamente ridotta. Opportuni investimenti in termini di dotazione ordinaria e di personale strutturato, permetterebbe di sostenere il salto di qualità verso la realizzazione di un centro integrato di proteomica e metabolomica di livello internazionale. ¹

Azioni

Attività in corso

La caratterizzazione delle proteine ha assunto un crescente interesse. Ciò perché le proteine sono i veri effettori delle vie metaboliche, di trasporto e di regolazione. Ciò significa che lo stato fisiologico è caratterizzato da un particolare pattern proteico (Proteoma). Per lo sviluppo di nuovi farmaci è molto importante anche avere a disposizione tecnologie per determinare i livelli di assorbimento nei diversi comparti ed eventuali variazioni dei livelli dei metaboliti (metabolomica).

Azioni da svolgere e punti critici

I principali obiettivi sono: Sviluppo di tecnologie per l'analisi proteomica e metabolomica. Integrare le tecnologie, al fine di fornire un approccio sinergico allo studio dei sistemi biologici e delle attività dei farmaci. Consolidare le collaborazioni in atto ed attivarne di nuove. Le competenze disponibili nel gruppo riguardano sia tecniche tradizionali (elettroforesi in gel e capillare, HPLC), sia quelle più innovative: a) la cromatografia 2D accoppiata alla tandem mass spectrometry.

Collaborazioni e committenti

- identificazione delle modificazioni post-traduzionali;
- caratterizzazione quali-quantitativa dei complessi proteici (sub- proteoma);
- studio delle variazioni di attività di complessi enzimatici a causa di switch redox o per modificazioni di cisteine;
- identificazione delle proteine secrete (secretoma) dalla cellula come segnali di una sua attività/risposta specifica in relazione a particolari condizioni;
- caratterizzazione di farmaci e loro metaboliti in fluidi biologici e tessuti. ¹



Finalità

Obiettivi

- Dip.Biochimica, Università di Padova
- Dep. of Biochemistry, University of Braunschweig, Germany
- Strahlenklinik, Essen (Germany) European JRC, Petten
- Dip. Patologia Università di Verona o ISPA-CNR Sezione di Torino
- Centro Biotecnologie Avanzate – Genova
- Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze Università di Milano- Bicocca
- Università di Milano
- Ospedale S.Matteo-Pavia Istituto G. Gaslini, Genova Indena SpA, Milano Kedrion, Barga (LU) ICRM-CNR INN-CNR

Risultati attesi nell'anno

I principali risultati attesi riguardano la caratterizzazione di mappe proteiche e metaboliche di campioni ottenuti da diversi stati fisiologici od a seguito di somministrazione di farmaci. Inoltre, ci si attende di individuare proteine differenzialmente espresse e/o livelli di metaboliti correlabili a malattie e/o azione di farmaci.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica del riconoscimento molecolare (ICRM)

Luogo di svolgimento attività: Roma (RM)

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Luogo di svolgimento attività: Padova (PD)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
351	145	0	351

importi in migliaia di euro



Sintesi chimica e diversità molecolare di composti biologicamente attivi

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare (ICB)
Sede svolgimento attività:	Sassari (SS)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Mauro Marchetti

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 37 di cui Ricercatori: 19

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Elisabetta Alberico	III	Davide Gaetano Fabbri	III	Barbara Sechi	VI
Emanuela Gigliola Azara	VI	Clara Fina'	VI	Davide Giovanni Costantino	VI
Roberto Nico Dallochio	V	Maria Giglio	VI	Sechi	
Giovanna Maria Delogu	I	Mauro Marchetti	I	Pietro Spanu	III
Alessandro Dessi'	V	Antonio Francesco Polinas	VI	Fausta Ulgheri	III
Maria Antonietta Dettori	III	Francesco Rassu	VI		

Temi

Tematiche di ricerca

La commessa sarà suddivisa in 10 workpackages, le attività saranno sviluppate da una serie di unità operative e porteranno al raggiungimento degli obiettivi prefissati nell'arco dei prossimi 3 anni. L'attività sarà basata sulla sintesi di piccole molecole organiche anche naturali e naturali analoghe sottoforma di singolo composto o di collezioni. La sintesi sarà applicata anche a sistemi multifunzionali complessi e porterà alla preparazione di composti biologicamente attivi e di loro intermedi.

Stato dell'arte

In tutti i più recenti documenti, volti all'identificazione di linee guida strategiche di sviluppo tramite la ricerca e l'innovazione a livello internazionale per il raggiungimento di obiettivi scientifici a medio-lungo termine, nei settori di maggior impatto sulla moderna società, si rileva come il passaggio dalle tradizionali tecnologie alle nuove a maggiore efficienza (enabling technologies) richieda una progettazione mirata e sempre più specifica delle componenti a base molecolare.

Azioni

Attività in corso

L'attività in corso è caratterizzata dalla sintesi di nuovi composti biologicamente attivi attraverso l'utilizzo di tecniche avanzate altamente selettive ed è articolata in 10 diversi workpackages tutti indirizzati alla preparazione di strutture molecolari innovative ad attività biologica. La presente commessa si inserisce nei nuovi campi innovativi della biologia chimica e della genetica chimica e si propone con una serie di tecnologie abilitanti patrimonio dei ricercatori afferenti.

Azioni da svolgere e punti critici

I dipendenti a tempo indeterminato: Fogheri Maria Laura (matr. 6661), Guiso Lucia Anna (matr. 7435), Pistidda Paola Matilde (matr. 16240) e il dipendente a tempo determinato Doro Maria Grazia (matr. 6892) sono distaccati presso l'Istituto di Genetica delle Popolazioni - Santa Maria la Palma (Sassari).



Collaborazioni e committenti

I gruppi di ricerca che fanno parte della commessa hanno in atto una serie di collaborazioni, sia a livello accademico che industriale. Le collaborazioni con le Università sono sviluppate con gli atenei di Milano, Sassari, Cagliari, Roma, Catania, Parma, Pisa e Firenze, mentre le principali collaborazioni industriali sono con le seguenti ditte: BIOPROGRESS, GSK-Verona, ENDURA-Bologna, SIFI-Catania. Inoltre sono in atto numerose collaborazioni internazionali con Francia, Spagna, Brasile e India.

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo è ottenere nuove molecole biologicamente attive e studiarne le interazioni con i sistemi biologici per ampliare le conoscenze nel settore della biologia chimica, della genetica chimica per giungere infine all'individuazione di nuovi farmaci e molecole bioattive. Utilizzando competenze di sintesi chimica, catalisi, biomimetica, produzione di librerie di composti bioattivi, peptidi, peptidomimetici, carboidrati, glicomimetici, analisi delle interazioni recettore-ligando, spettroscopia.

Risultati attesi nell'anno

Dallo svolgimento del lavoro descritto nella commessa ci si attende nell'arco di tre anni la realizzazione nuove molecole biologicamente attive, lo studio delle loro interazioni con i sistemi biologici con lo scopo di sia di produrre nuovi agenti terapeutici e diagnostici sia di ampliare le conoscenze nel settore della biologia chimica, della genetica chimica. Questo porterà all'individuazione di nuovi farmaci e molecole bioattive di origine sintetica che saranno opportunamente testati.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
540	195	188	728

importi in migliaia di euro



Sintesi di piccole molecole per patologie inabilitanti

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare (ICB)
Sede svolgimento attività:	Roma (RM)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Paolo Bovicelli

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Elenco dei partecipanti

Temi

Tematiche di ricerca

Sintesi di nuovi farmaci per malattie da stress ossidativi (polifenoli, flavonoidi e derivati maggiormente biodisponibili), sintesi di nuovi farmaci per malattie neurodegenerative (inibitori di secretasi, induttori di caspasi, bet-sheet-breakers), inibitori di proteasi per la terapia di patologie specifiche (inibitori di proteasi, inibitori di caspasi, peptidomimetici)

Stato dell'arte

'Finalizzazione delle attività in corso alle tematiche della commessa, compresa l'effettuazione di test biologici preliminari su modelli già sintetizzati per orientare le attività future. Studio di fattibilità ed inizio delle attività nuove previste. Punto critico principale per lo svolgimento delle attività è oltre le risorse finanziarie e di personale, l'ammodernamento improrogabile delle apparecchiature strettamente necessarie (spettrometro NMR, GC-MS).'

Azioni

Attività in corso

'know-how: - metodologie per la sintesi di polifenoli - tecniche chemio-enzimatiche per la esterificazione selettiva di flavonoidi - tecniche di sintesi di peptidi chemotattici e amiloidogenici - metodi di apertura diastereoselettiva di piccoli cicli e sintesi di amminopolialcoli e amminoacidi non naturali per peptito-mimetici - Inibitori di MMP-2 e MMP-9 già allo studio per le attività inibitorie di metallo proteasi di matrice, già preparati, alcuni dei quali brevettati'

Azioni da svolgere e punti critici

'Sintesi di molecole con l'attività biologica prevista dalla commessa. Test biologici delle molecole preparate, da effettuarsi presso i laboratori delle istituzioni coinvolte nel progetto. Produzione in scala preparativa delle molecole più interessanti. Eventuale spin-off con prodotti commercializzabili.'

Collaborazioni e committenti

'Sintesi di idrossitirosolo da materiali di scarto, derivati ossigenati dell'alcol omovanillico, flavoni alogenati ed alchilati, composti peptidici e non peptidici ad attività inibitoria di caspasi e secretasi, sul modello di molecole già note per la loro attività biologica, pseudopeptidi destabilizzanti l'aggregazione di beta-amiloidi, resistenti al metabolismo, derivati del saquinavir, inibitore dell'HIV proteasi, preparazione di inibitori di metallo proteasi di matrice altamente selettivi'

Finalità

Obiettivi

- Centro Ricerche Polifarma S.p.A., Roma
- Università "La Sapienza" di Roma, Dipartimento di Chimica
- Università "La Sapienza" di Roma, Dipartimento di Tecnologie Farmaceutiche



- Istituto di Gnomica e Biologia Integrativa dell'Università di Delhi (India)
- Vassar College, Dipartimento di Chimica, Poughkeepsie, NY USA
- Ospedale San Raffaele di Milano (HSR)
- Istituto di Tecnologie Biomediche di Milano (ITB)
- Università di Trieste, Dipartimento di Farmacologia¹

Risultati attesi nell'anno

Flavonoidi liposolubili ad attività antiossidante e test della loro attività, anche come antiproliferativi ed induttori di caspasi. Peptidomimetici come inibitori dell'aggregazione di beta-amiloidi. Studio di modelling di piccole molecole come inibitori di caspasi ed inizio dei lavori per la sintesi di modelli.¹

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
327	45	0	327

importi in migliaia di euro



Sintesi e caratterizzazione mediante metodologie chimiche innovative, di scaffold molecolari per l'individuazione di nuove molecole biologicamente attive.

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Mauro Panunzio

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 13 di cui Ricercatori: 8

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Elisa Bandini	V	Maurizio Ghirardelli	VIII	Mauro Panunzio	I
Arturo Battaglia	II	Andrea Guerrini	V	Silvana Roda	V
Giovanni Bragaglia	V	Daniela Lughì	VI	Giancarlo Seconi	I
Roberta Chiodini	VIII	Viscardo Malta	II	Greta Varchi	III
Maria Gioia D'anna	VI	Giorgio Martelli	II	Alessandro Venturini	III

Temi

Tematiche di ricerca

Metodologie sintetiche eco-compatibili. Nuove tecniche non convenzionali (es. microonde) eco-compatibili. Sintesi di composti biologicamente attivi attraverso elaborazione /funzionalizzazione di molecole di origine naturale.. Verranno proseguiti gli studi su molecole con attività anticancro, come i taxani, o i derivati della camptotecina. Studio di reazioni selettive per la creazione di piattaforme molecolari a potenziale attività biologica. Sviluppo di metodologie basate sull'uso di reazio

Stato dell'arte

La ricerca internazionale nel campo della chimica organica ha come obiettivi la messa a punto di processi industriali eco-compatibili e la sintesi di nuovi prodotti e nuovi processi a basso costo e ad elevato valore aggiunto. Nel campo delle sostanze biologicamente attive, oggetto del nostro interesse scientifico, molte risorse vengono destinate alla sintesi di farmaci anticancro, di farmaci per il sistema nervoso centrale e di antibiotici e antivirali. E' in quest'ambito che si inserisce la no

Azioni

Attività in corso

Sviluppo di nuove metodologie sintetiche eco-compatibili. Sintesi di piccoli peptidi a potenziale attività anticancro. Sintesi di derivati tassanici. Studio di reazioni di Diels-Alder e Staudinger per la preparazione di piccoli eterocicli, scaffold di prodotti ciclici ed aciclici a potenziale attività biologica.

Azioni da svolgere e punti critici

Nonostante il gruppo sia ben presente sullo scenario scientifico internazionale, come dimostra la produzione scientifica, esiste una oggettiva difficoltà di disporre di una massa critica di mesi/uomo per competere con gruppi di ricerca a risonanza internazionale. Scarse risorse economiche di origine pubblica per aggiornare il parco strumentazione.

Collaborazioni e committenti

SKB- Verona, Indena-Milano, Farchemia-Treviglio



Finalità

Obiettivi

Sintesi di nuovi scaffold, intermedi per la preparazione di composti ad attività biologica. Nuovi processi ecocompatibili per l'ottenimento degli stessi.

Risultati attesi nell'anno

1 anno: Produzione di nuove librerie di composti a potenziale attività biologica da sottoporre a screening farmacologici. Sintesi di derivati tassatici sostituiti da un ammino gruppo in posizione 14. Sintesi di derivati b-lattamici da utilizzare come inibitori enzimatici

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)

Luogo di svolgimento attività: Firenze (FI)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
664	189	154	818

importi in migliaia di euro



Sostanze bioattive da fonti naturali

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare (ICB)
Sede svolgimento attività:	Pozzuoli (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Agata Gambacorta

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca

La presente commessa di ricerca ha lo scopo di ottenere nuove molecole biologicamente attive e di studiarne le interazioni con i sistemi biologici, attraverso lo studio di fonti naturali di prodotti chimici come gli organismi marini, i batteri estremofili, i funghi e le piante. La ricerca di nuovi metaboliti porterà all'individuazione di farmaci ed agrofarmaci innovativi di origine naturale e natural-like

Stato dell'arte

Isolamento e studio di ceppi microbici per la produzione di idrogeno, e utilizzo della loro biomassa. Modifica chimica di molecole naturali per aumentare l'indice terapeutico. Ottenimento di polisaccaridi dai prodotti di scarto dell'industria agro-alimentare. Studi su sostanze bioattive da organismi marini e studio del loro metabolismo. Punti critici: risorse umane ed economiche da acquisire

Azioni

Attività in corso

L'ottenimento mediante tecniche a basso impatto ambientale di sostanze da fonti naturali e la loro trasformazione in prodotti ad alto valore aggiunto è ricerca di grande interesse e di grande attualità. Nel contesto scientifico attuale si stanno sviluppando in tutto il mondo importanti programmi scientifici che hanno come obiettivo la ricerca di nuovi potenziali farmaci da fonti marine, da estremofili e da scarti dell'industria agro-alimentare.

Azioni da svolgere e punti critici

Nuovi composti da organismi marini e e loro applicazione. Semisintesi di sostanze con più alto valore applicativo. Maricoltura per ottenimento di sostanze bio-attive. Utilizzo degli estremofili per la produzione di biomolecole a basso ed alto peso molecolare. Messa a punto di metodiche per preservare le sostanze bioattive negli alimenti. Individuazione e manipolazione di processi metabolici per l'ottenimento di prodotti a basso peso molecolare

Collaborazioni e committenti

Lo sviluppo del progetto ha già portato all'identificazione di nuove sostanze da organismi marini e all'identificazione di nuovi estremofili produttori di biomolecole di interesse applicativo. Si stanno caratterizzando nuovi metabolismi da macro- e microorganismi marini ed estremofili. Studio sulla definizione di attività catalitiche di nuove specie sono in progresso. Infine studi sull'ottenimento di prodotti a più alto valore aggiunto da scarti dell'industria alimentare sono in corso.

Finalità

Obiettivi

¹UNI.Me; UNI-Dehi, CNR, Uni-CT; UNI-Na; ENEA-Roma UNI-Atene, India, Moldavia, Perù, Gran Bretagna, Lisbona. Valencia-Spagna; Russia, UNI-VR. Provincia di Salerno. MIUR; Regione Campania; Provincia di Salerno.¹



Risultati attesi nell'anno

'Studio applicativo di molecole da organismi marini sia in forma nativa che modificati. Estremofili da utilizzare nella biorimediazione, beni culturali, agro-alimentare. Ottenimento di consorzi misti per la produzione di idrogeno. Valorizzazione degli scarti ortofrutticoli. Ottenimento di sintoni chirali e/o biomolecole attive e di lipasi. Manipolazione di alcuni metabolismi di macro- e microorganismi per l'ottenimento di composti bioattivi. '

Potenziale impiego:

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
821	0	0	821

importi in migliaia di euro



Studi molecolari e valorizzazione di risorse per il settore biomedico

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare (ICB)
Sede svolgimento attività:	Valverde (CT)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Giovanni Nicolosi

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Elenco dei partecipanti

Temi

Tematiche di ricerca:

"Definizione di metaboloma di piante a scopo applicativo. Isolamento e affinità molecolare di glicerosforil inositoli e loro modifiche strutturali. Sviluppo di derivati calixarenici come recettori abiotici per il riconoscimento dell'eparina. Sintesi di glicoconiugati ad attività immunostimolante. Preparazione di farmaci chirali in forma enantiopura."

Stato dell'arte

"Determinazione strutturale dei metaboliti isolati e che presentano attività antinfiammatoria. Completamento degli step sintetici atti ad avere accesso a glicerosforil myo-inositolo. Studio sul meccanismo di riconoscimento dell'eparina utilizzando calixareni derivatizzati con amminoacidi. Determinazione della struttura molecolare di glicomulticoniugati. Individuazione di un sistema biocatalitico atto a realizzare la separazione enantiomerica di precursori di farmaci."

Azioni

Attività in corso

"Esiste interesse crescente nel settore farmaceutico per nuovi principi naturali bioattivi. Glicerosforilinositoli hanno ruolo base nella riproduzione cellulare ed esiste interesse per individuare nuovi inositoli bioattivi. La disponibilità di validi dispositivi per il controllo dell'eparina nel trattamento ematico è tuttora modesto. Studi hanno dimostrato una azione immunostimolante potenziata di glicomulticoniugati con antigeni. Interesse commerciale esiste per il chiral switch di farmaci."

Azioni da svolgere e punti critici

Sviluppo di nuove molecole naturali di interesse fitoterapico. Sviluppo di nuovi inositoli di interesse biomedico. Sviluppo di un dispositivo per il controllo dell'eparina in dialisi. Creazione di vaccini sintetici. Preparazione di farmaci oftalmici in forma enantiopura."

Collaborazioni e committenti

"È in corso lo studio dei principali metaboliti presenti in estratti lipofili di 4 differenti piante officinali. Si stanno sviluppando processi di regioprotezione di ciclitoli per disporre di sintoni chinali utili alla sintesi di inositoli-4-fosfato. È in corso lo studio sul meccanismo di riconoscimento tra eparina e calixarene-derivatizzato con gruppi amminoacidici. È in corso la sintesi di antigene di tipo Tfn. Sono in preparazione precursori racemici di un farmaco di interesse oftalmico."

Finalità

Obiettivi

"Agroindustry Advanced Technologies SpA Istituto MarioNegri Sud Regione Siciliana - Assessorato Agricoltura e Foreste - Divulgazione "Piante officinali" MIUR attraverso il Programma Operativo Nazionale Parco Scientifico e Tecnologico della Sicilia National Research Council of Canada



Università di Catania, Facoltà di Farmacia Istituto CNR di Chimica e Tecnologia dei Polimeri
Università di Messina, Dipartimento Farmaco-biologico¹

Risultati attesi nell'anno

'Definizione dei principali costituenti del metaboloma di almeno una pianta officinale. Sviluppo di una sintesi per la preparazione in gram-scale di almeno un fosfoderivato GroPIIns4P. Definizione delle costanti di affinità tra eparina e derivati calixarene-amminoacidi. Sintesi di almeno un glicoconjugato recante due unità antigene. Preparazione di almeno un precursore chirale in forma enantiopura di un farmaco oftalmico.'

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
871	431	0	871

importi in migliaia di euro



Studi sulle relazioni tra struttura e funzione di biomolecole naturali e sintetiche implicate nelle patologie umane

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica biomolecolare (ICB)
Sede svolgimento attività:	Pozzuoli (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Vincenzo Di Marzo

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 22 di cui Ricercatori: 11

Elenco dei partecipanti

Pietro Amodeo	liv. III	Antonella Manca	liv. III	Carla Maria Rozzo	liv. III
Giuseppina Andreotti	III	Daniela Matto	VII	Teodorico Tancredi	I
Tiziana Bisogno	III	Dominique Juliette		Raffaele Turco	V
Emilio Paolo		Melck	VI	Maria Rosaria	
Castelluccio	VI	Alfredo Milone	III	Vaccaro	V
Ottavio De Luca	VIII	Vincenzo Mirra	VI	Salvatore	
Vincenzo Di Marzo	II	Andrea Motta	II	Zambardino	V
Corrado Di Pinto	IV	Giuseppe Palmieri	II		
Gaetano Leone	VII	Marina Pisano	III		

Temi

Tematiche di ricerca:

Studi finalizzati ad applicazioni biomediche su: 1) interazioni proteina- proteina; 2) tirosina chinasi implicate nella proliferazione cellulare; 3) “pathways” proteici bersaglio di molecole naturali o sintetiche; 4) meccanismi d’azione della calcitonina; 5) relazioni struttura/attività farmacologica di ammididi bioattive di acidi grassi a lunga catena, 6) nuovi amminoacidi non proteinogenici, peptidi e loro coniugati; 7) meccanismo di azione di derivati dell’ artemisinina e di composti perossidici.

Stato dell’ arte

Il sequenziamento del genoma consente di conoscere le basi molecolari delle funzioni cellulari. E’ ora necessario conoscere la funzione delle proteine codificate dai geni identificati; scoprirne le modificazioni cui vanno incontro durante eventi patologici, la struttura e le modalità di interazione con altre molecole (ligandi, substrati, cofattori, effettori); ed identificare le relazioni tra genotipo, fenotipo e risposta terapeutica per ottenere nuovi farmaci e personalizzarne l’ uso.

Azioni

Attività in corso

Studi sulle relazioni fra struttura e funzione degli enzimi implicati in processi patologici. Sviluppo di potenziali “probes” molecolari sia attraverso la sintesi chimica tradizionale e combinatoriale, che sfruttando la biodiversità molecolare delle sostanze naturali. Messa a punto di test di attività farmacologica in vitro, necessari per la comprensione delle relazioni tra struttura delle proteine e la loro capacità di riconoscere ed interagire con piccole molecole e macromolecole.

Azioni da svolgere e punti critici

Scelta delle strategie sperimentali necessarie: 1) a stabilire la partecipazione di proteine e loro ligandi nelle patologie in esame; 2) alla sintesi di “probes molecolari” e all’ analisi delle loro interazioni con le proteine bersaglio. Individuazione delle istituzioni esterne con cui collaborare in esperimenti sul possibile uso terapeutico delle molecole sviluppate, e sulla loro ottimizzazione, negli appropriati modelli. I dipendenti Anselmi e Moretto in pensione dal 01/02/05.



Collaborazioni e committenti

Collaborazioni con altri Istituti del CNR ed Enti pubblici di Ricerca, Università Italiane e Straniere ed industrie farmaceutiche Italiane e Straniere, saranno necessarie per condurre esperimenti atti a stabilire il possibile uso terapeutico delle molecole sviluppate in appropriati modelli animali delle patologie in esame.

Finalità

Obiettivi

Studio genetico/funzionale e delle interazioni proteina/proteina e proteina/ligando, per proteine coinvolte nelle patologie in esame. Ottimizzazione delle molecole al fine di aumentarne l'efficacia, la stabilità e la biodisponibilità. Sviluppo di metodologie da affiancare alle competenze già utilizzate nei seguenti campi: caratterizzazione genomico/funzionale di proteine, sintesi organica, spettrometria di massa, NMR, farmacologia in vitro, modelling molecolare, calcolo e cristallografia.

Risultati attesi nell'anno

1 - 2 anno: Nuovi modelli di calcolo e metodiche di sintesi organica e di analisi mediante NMR e spettrometria di massa. Comprensione di meccanismi alla base della regolazione delle proteine in esame, e loro ruolo nelle patologie in esame. Sintesi e test in vitro di nuovi antitumorali, analgesici, anti-infiammatori, neuroprotettivi, antibiotici, antimalarici.

3 anno: Ottimizzazione delle molecole per alta specificità, bassa tossicità, stabilità alla degradazione, buona penetrabilità.

Potenziale impiego:

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)

Luogo di svolgimento attività: Firenze (FI)

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Luogo di svolgimento attività: Milano (MI)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.254	457	78	1.332

importi in migliaia di euro



Targeting e inibizione dell'angiogenesi

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione molecolare di proprietà biochimiche (aspetti farmacologici, biologici e genetici)
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica del riconoscimento molecolare (ICRM)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Matteo Zanda

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Tem

Tematiche di ricerca

L'angiogenesi è un fenomeno che nell'adulto è legato esclusivamente all'insorgenza di situazioni patologiche, ad esempio tumori solidi. L'inibizione e il targeting dell'angiogenesi, sfruttando dei marker proteici selettivi che vengono over-espressi in condizioni di angiogenesi, rappresentano delle strategie di grande e crescente importanza in terapia e diagnosi delle malattie connesse.

Stato dell'arte

Modulo (WP) 1 (ICB e ISTM): Sintesi stereoselettiva di collezioni di piccole molecole organiche naturali e naturali-analoghe mirate a sottotipi recettoriali delle integrine. Modulo (WP) 2 (ICRM): Targeting dell'angiogenesi via inibizione di Metalloproteinasi di Matrice (MMP) e binding al dominio ED-B della fibronectina. Modulo (WP) 3 (IBB): Antagonisti di PIGF/Flt-1 come nuovi lead compound ad attività anti-angiogenica.¹

Azioni

Attività in corso

Sono già noti diversi markers proteici validati che vengono over-espressi in condizioni di angiogenesi, che includono la trombospondina, il VEGF, il PIGF, integrine, il PF-4, l'ED-B, alcune metalloproteasi di matrice (MMP). Sono disponibili sul mercato, o in fase clinica avanzata, diverse molecole e anticorpi che agiscono secondo i meccanismi di targeting ed inibizione dell'angiogenesi, soprattutto nella diagnosi e terapia del cancro.

Azioni da svolgere e punti critici

Design, sintesi e valutazione biologica di molecole per il targeting e l'inibizione dell'angiogenesi, sfruttando i markers PIGF, integrine (alfaVbeta3 e alfaVbeta5), ED-B e MMP. Individuazione di tecniche di sintesi, anche combinatorie, innovative e mirate di nuove entità molecolari per il targeting e l'inibizione dell'angiogenesi.¹

Collaborazioni e committenti

RTN UE "Inibitori Fluorurati Selettivi delle Metalloproteasi di Matrice 3 e 9", coordinatore Matteo Zanda (PF5) (1 Ott 2002-30 Sett 2006): sono stati individuati almeno dieci inibitori fluorurati nanomolari di diverse MMPs. PI UE "STROMA" (PF6), coordinatore di unità: Matteo Zanda (1 Gen 2004-31 Dic 2007): sono in corso ricerche su design e sintesi di mimici sintetici di anticorpi per il targeting di markers dell'angiogenesi, e di pro-drugs per la terapia di tumori solidi.¹

Finalità

Obiettivi

Collaborazioni: ICB: (1) Università degli Studi di Parma – Fac. Farmacia Dip. Farmaceutico; (2) Università Studi Sassari – Fac. Scienze Matematiche Fisiche Naturali, Dip. Chimica; (3) Sigma-Tau – Pomezia IBB; (2) Ist. Genetica e Biofisica (IGB) del CNR, Napoli; (2) Thromb-X NV (TX), Leuven, Belgio. ICRM: (1) ETH Zurich, Dep. Applied Biosciences (Prof. Dario Neri); (2) Ist. Farmacologico Mario Negri Bergamo (Dr. Raffaella Giavazzi). Committenti: Commissione Europea.¹



Risultati attesi nell'anno

Individuazione di alcune molecole attive a livello almeno micromolare verso I recettori target.
Identificazione e messa a punto di metodologie sintetiche efficaci e mirate per le molecole target.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini (IBB)

Luogo di svolgimento attività: Napoli (NA)

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare (ICB)

Luogo di svolgimento attività: Sassari (SS)

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Luogo di svolgimento attività: Milano (MI)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
303	101	0	303

importi in migliaia di euro





Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto

Descrizione obiettivi generali

Sintetizzare e sviluppare nuovi materiali a diversi livelli di organizzazione, metodologie di analisi/caratterizzazione e modifiche chimiche (bulk e di superficie), tecniche di progettazione, ingegnerizzazione e processi di produzione, in modo da poter sviluppare strutture multi-funzionali per applicazioni specifiche.

numero commesse	numero moduli	personale equivalente tempo pieno	
		ricercatori	totale
10	3	78	131

Istituti esecutori

Biostrutture e Bioimmagini
Chimica dei Composti Organo-Metallici
Chimica e Tecnologia dei Polimeri
Materiali Compositi e Biomedici
Sintesi Organica e la Fotoreattività
Studio delle Macromolecole
Tecnologia delle Membrane

Sintesi dei risultati attesi

(da revisionare a cura dei comitati ordinatori)

Sintetizzazione e sviluppo di nuovi materiali utili per l'ottimizzazione della composizione finale di sostituti innovativi di tessuti ossei a diversi livelli di organizzazione; realizzazione di nuove metodologie di analisi per il rilascio controllato di farmaci, loro caratterizzazione e modifiche chimiche; tecniche di progettazione, ingegnerizzazione e processi di produzione per il miglioramento di strutture multi-funzionali relative a specifiche applicazioni nei settori automobilistico e agroalimentare.

Risorse complessive del triennio

Le risorse da impegnare per questo progetto nel triennio sono:

anno	risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
	A	B	C	D = A + C
2005	17,19	6,25	1,45	18,64
2006	16,80	6,72	1,45	18,25
2007	16,34	7,19	1,45	17,79

valori in milioni di euro



Biomateriali ed ingegneria dei tessuti

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per i materiali compositi e biomedici (IMCB)
Sede svolgimento attività:	Napoli (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Luigi Ambrosio

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 9 di cui Ricercatori: 6

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Luigi Ambrosio	I	Piero Cerrai	II	Luigi De Vito	VII
Mariarosaria Bonetti	VI	Caterina Cristallini	III	Giulio Dante Guerra	II
Assunta Borzacchiello	III	Roberto De Santis	III	Mario Tricoli	IV

Temi

Tematiche di ricerca:

Le attività di ricerca riguardano lo sviluppo di tecnologie di progettazione e di prototipizzazione rapida, per la messa a punto di materiali in grado di sostituire parti del corpo umano con le stesse proprietà e funzioni specifiche, in modo da attivare risposte di cellule e geni, e incorporare sostanze (farmaci, fattori di crescita, etc.) da rilasciare con una cinetica programmata.

Stato dell'arte

Le risorse umane ed economiche destinate all'attività di ricerca nel settore biomedicale rivestono importanza strategica al fine di garantire una sempre migliore qualità della vita con un naturale decremento della spesa sociale.

Azioni

Attività in corso

Le attività di ricerca riguardano lo sviluppo di tecnologie di progettazione e di prototipizzazione rapida, per la messa a punto di materiali in grado di sostituire parti del corpo umano con le stesse proprietà e funzioni specifiche, in modo da attivare risposte di cellule e geni, e incorporare sostanze (farmaci, fattori di crescita, etc.) da rilasciare con una cinetica programmata.

Azioni da svolgere e punti critici

Le attività presentate sono ad elevato rischio per la molteplicità dei fattori e competenze coinvolte. Attualmente la conoscenza acquisita permette di identificare punti critici in quelle attività che riguarda l'interazione materiali e cellule per la ricostruzione di tessuti omologhi a causa della tridimensionalità di essi. Lo sviluppo di nuove competenze e tecnologie strumentali in fase di acquisizione e programmate possono rendere fattibili molti punti critici.

Collaborazioni e committenti

CRIB, Università di Napoli Federico II, Università di Trento, Università di Catania, Istituto Ortopedici Rizzoli, Politecnico di Milano, Universitat Politecnica de Catalunya, Barcelona, Spain, IRC in Biomedical Materials, Queen Mary and Westfield College, London, U.K., University of Cambridge, U.K., ETH and University of Zurich, Switzerland, University of Basel, Switzerland, University of Manchester, United Kingdom, University of Edinburgh, United Kingdom, University of Wien, Austria



Finalità

Obiettivi

Sviluppo di materiali e strutture multi-funzionali seguendo approcci progettuali e soluzioni di tecnologie dei materiali, che derivano dal concetto di "learning from nature" focalizzando la ricerca su polimeri e compositi capaci di riparare, rigenerare tessuti naturali ed implementare sinergicamente eventuale terapia farmacologica. Tale settore è caratterizzato da una elevata interdisciplinarietà richiedendo principalmente competenze nella scienza dei materiali, ingegneria, biologia e medicina.

Risultati attesi nell'anno

Definizione dei parametri chimico-fisico e biologici di materiali e strutture per la riparazione e rigenerazione dei tessuti. Sviluppo di tecnologie di preparazione, metodologie di preparazione di tessuti omologhi (bioreattori) e di prototipizzazione integrate a tecniche di analisi (TAC, RMI). Pubblicazioni e brevetti. I diversi risultati sono estremamente collegati e si può considerare uno sviluppo temporale in cinque anni.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di biostrutture e bioimmagini (IBB)

Luogo di svolgimento attività: Napoli (NA)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.370	962	127	1.496

importi in migliaia di euro



Correlazioni struttura-proprietà e metodologie innovative per la caratterizzazione dei sistemi polimerici

Descrizione generale

Progetto: Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto

Tipologia di ricerca: Progetti a carattere strategico

Istituto esecutore: Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri (ICTP)

Sede svolgimento attività: Arco Felice (NA)

Dip. di prevista afferenza: Progettazione Molecolare

Responsabile indicato: Pellegrino Musto

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 13 di cui Ricercatori: 9

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Mario Abbate	III	Maria Emanuela Errico	III	Giustino Orefice	VIII
Luciano Amelino	IV	Anna Esposito	VII	Francesco Palumbo	IV
Maurizio Avella	II	Patrizia Ferraro	VII	Anna Principe	V
Pietro Buono	V	Emanuele Fiore	VI	Giuseppe Ragosta	I
Luigi Calandrelli	VII	Barbara Immirzi	III	Maria Raimo	III
Sossio Cimmino	II	Rosa Iovinelli	VII	Antonietta Russo	VIII
Loredana D'orazio	III	Antonio Lahoz	VII	Pietro Russo	III
Pasquale De Luca	VIII	Mario Malinconico	II	Roberto Russo	III
Diana De Rosa	VII	Carlo Mancarella	IV	Ennio Scafora	IV
Vincenzo Di Liello	V	Pellegrino Musto	II	Gennaro Scarinzi	III
Maria Laura Di Lorenzo	III	Giuseppe Narciso	V	Clara Maria Silvestre	III
Emilia Di Pace	III	Raffaele Nazzaro	VII	Achille Tagliatalata	IV

Tem

Tematiche di ricerca:

Realizzazione di nuovi nanocompositi a matrice termoindurente o termoplastica attraverso tecnologie sol-gel, polimerizzazione in massa o estrusione. Studio dell'influenza di cariche nanometriche sui processi di cristallizzazione di polimeri commerciali. Applicazione di tecniche spettroscopiche allo studio della diffusione nei polimeri; meccanica della frattura per lo studio dei meccanismi molecolari di deformazione. Nuovi approcci teorico-sperimentali nella calorimetria modulata

Stato dell'arte

La commessa prende le mosse da un scenario dinamico in cui i materiali polimerici, sempre più pervasivi in tutti i settori di applicazione, evolvono rapidamente da opzioni 'cost-effective', a sistemi funzionali in grado di rispondere alle più sofisticate esigenze tecnologiche. La capacità di progettare e realizzare materiali 'ad hoc' si basa sulla conoscenza delle correlazioni struttura-proprietà e sul conseguente controllo delle variabili che determinano le proprietà ultime.

Azioni

Attività in corso

Realizzazione e caratterizzazione di materiali ibridi nanostrutturati a morfologia bifasica o co-continua. Analisi delle possibili applicazioni nel settore opto-elettronico e nelle tecnologie di separazione. -Studio dei processi di formazione e dell'evoluzione delle strutture cristalline in omopolimeri e miscele polimeriche. -Metodologie innovative di caratterizzazione basate sulla



spettroscopia FTIR, la calorimetria, le proprietà meccaniche e di frattura e la microscopia elettronica.

Azioni da svolgere e punti critici

Gli obiettivi sono da considerarsi altamente realizzabili sulla base delle competenze presenti e dei finanziamenti . Come punti critici si possono citare : a) ottimizzazione delle metodologie preparative per la realizzazione di nanocompositi a morfologia controllata. b) complessità delle regioni interfasiche e relativa caratterizzazione.c) arruolamento di nuove figure professionali in grado di sviluppare temi di ricerca avanzati

Collaborazioni e committenti

University of Loughboroug, UK, Prof. L. Mascia; University of Tennessee, Prof. B. M. Wunderlich; Institute of Macromolecular Chemistry, IASI, Romania, Prof. C. Vasile; Bulgarian Academy of Science, Prof. R. Kotsilkova; Università Federico II , Prof. G. Mensitieri; Università di Salerno, Prof. G. Guerra; Centro Ricerche Fiat-Elasis, Ing. L. Zeloni;

Finalità

Obiettivi

Realizzazione e caratterizzazione di materiali micro e nanostrutturati con elevata stabilità foto- e termo-ossidativa e migliorate proprietà meccaniche e di barriera rispetto ai polimeri convenzionali. Sviluppo di materiali polimerici con caratteristiche mirate attraverso il controllo dei processi di cristallizzazione e mediante miscelazione reattiva e non. Sviluppo di metodologie d'indagine non convenzionali per la caratterizzazione molecolare, morfologica, e meccanica dei polimeri

Risultati attesi nell'anno

Materiali polimerici ad elevate prestazioni fisico-meccaniche (risultati attesi nel corso del triennio)
Metodiche di indagine molecolare e strutturale (risultati attesi nel corso del triennio). -Metodiche d'indagine termica, morfologica e meccanica (risultati attesi nel corso del triennio).

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell' istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.260	429	50	1.310

importi in migliaia di euro



Membrane in organi artificiali e biotecnologie.

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la tecnologia delle membrane (ITM)
Sede svolgimento attività:	Arcavacata di Rende (CS)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Enrico Drioli

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 4 di cui Ricercatori: 2

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Iolanda Apa	VII	Lidietta Giorno	III	Anna Nigri	VII
Loredana De Bartolo	III	Sabrina Morelli	III		

Temi

Tematiche di ricerca:

Le attività da svolgere continueranno seguendo quelle già in corso approfondendo ulteriori aspetti delle risoluzioni cinetiche enantioselettive, delle proprietà di trasporto e dell'enantioselettività delle membrane e delle loro prestazioni nei reattori biocatalitici multifasici e membrane contactors. Saranno anche realizzati bioreattori a membrana innovativi con nuove configurazioni al fine di ottimizzare le proprietà di trasporto di metaboliti e cataboliti per le colture in vitro di epatociti.

Stato dell'arte

Lo sviluppo di sistemi in vitro per la biotrasformazione di farmaci rappresenta un'alternativa valida, all'utilizzo di cavie animali, per i test preliminari degli effetti dei farmaci sul fegato. Lo sviluppo tecnologie per la produzione di enantiomeri otticamente puri è una necessità largamente richiesta su scala mondiale a causa degli effetti collaterali dovuti all'uso di farmaci, additivi alimentari, etc. non specifici.

Azioni

Attività in corso

Sviluppo ed applicazione di membrane artificiali per la realizzazione di processi enantioselettivi a membrana (reattori enantio-catalitici a membrana in sistemi bifasici; risoluzione di miscele racemiche, emulsificatori a membrana, etc). Studio e caratterizzazione di membrane e bioreattori a membrana per applicazioni biomedicali (coltura di epatociti, biotrasformazioni di farmaci, biocompatibilità, etc.)

Azioni da svolgere e punti critici

Progettazione a livello molecolare delle proprietà di trasporto e della geometria del reattore a membrana a fibra cava (in configurazione tubi-e- mantello). Ulteriori significativi avanzamenti nelle ricerche sono anche legati allo sviluppo dell'organico.

Collaborazioni e committenti

Tra le principali collaborazioni vi sono quelle con Università e Centri di Ricerca (italiani ed esteri) ed aziende secondo quanto previsto dai diversi progetti di ricerca in corso e finanziati/co-finanziati dalla EU, dal MIUR, dal MAE, dal CNR (accordi bilaterali).



Finalità

Obiettivi

Messa a punto di sistemi a membrana per la produzione di enantiomeri otticamente puri. Recupero di sottoprodotti ad alto valore aggiunto e loro valorizzazione. Messa a punto di sistemi a membrana per lo studio in vitro dell'effetto di farmaci su colture di epatociti. Sintesi di materiali biocompatibili.

Risultati attesi nell'anno

Tra i principali risultati attesi vi sono la realizzazione di nuovi bioreattori a membrana capaci di operare con maggiore efficienza biochimica ed energetica nelle trasformazioni biologiche condotte da enzimi e/o cellule immobilizzate. La funzionalizzazione della superficie di membrane per migliorare l'adesione cellulare, la biocompatibilità e l'omogeneità della distribuzione delle biomolecole di interesse. Sviluppo temporale: circa tre anni in accordo con i progetti di ricerca finanziati.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
966	890	96	1.063

importi in migliaia di euro



Nuovi metodi per lo sviluppo e la caratterizzazione di materiali polimerici ottenuti con sintesi non convenzionali

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Sede svolgimento attività:	Ferrara (FE)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Marco Scoponi

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 11 di cui Ricercatori: 7

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Marco Ballestri	V	Massimo Gazzano	III	Silvana Roda	V
Giovanni Bragaglia	V	Silvano Lora	II	Marco Scoponi	III
Mario Carena	II	Anita Manderioli	IV	Luisa Tondelli	III
Fabio Comelli	II	Stefano Ottani	III		
Silvano Favaretto	V	Giuliano Pizzuto	V		

Temi

Tematiche di ricerca:

Esperimenti adsorbimento/rilascio di biomolecole su nano/microsfere polimeriche e valutazioni comparative in vitro e in vivo
Caratterizzazione e sintesi di polimeri interpenetrati fotoreticolati contenenti cristalli liquidi (PDLC)
Studio delle proprietà termiche e delle correlazioni proprietà-struttura del poli(2-tiotrietileneadipato)
Studio delle interazioni molecolari di polietilenglicoli in funzione del peso molecolare
Studi su adesione e crescita di cellule endoteliali, muscolari e osteoblasti

Stato dell'arte

La veicolazione di farmaci con nanosfere polimeriche per ridurre la quantità di farmaco prolungando l'effetto terapeutico in patologie virali e/o tumorali
La sintesi di nuovi polimeri biodegradabili e biocompatibili per applicazioni in campo biomedico e per l'ingegneria tessutale.
La Fotopolimerizzazione per vernici e inchiostri come rivestimenti per superfici di film termoplastici, metalli e carta
La caratterizzazione avanzata di materiali polimerici per applicazioni industriali

Azioni

Attività in corso

Veicolazione di biomolecole con nano/microsfere polimeriche con ridotta penetrazione intracellulare
Cinetiche di polimerizzazione e caratterizzazione di materiali termo- e foto-indurenti
Preparazione di idrogeli termosensibili e di matrici polimeriche per la crescita cellulare a base polifosfasfani con polilattidi o poliglicolidi. Caratterizzazione dinamico-meccanica e termica di miscele polimeriche biodegradabili e biocompatibili.
Proprietà termodinamiche di poliglicoli in soluzione

Azioni da svolgere e punti critici

Gli studi sui materiali polimerici ottenuti per fotopolimerizzazione sono solo parzialmente finanziati da contratti esterni. I costi di gestione per la ricerca e il personale non consentono un finanziamento adeguato al mantenimento della ricerca e al trasferimento tecnologico. Tutte le altre attività in corso hanno una fattibilità solo sul medio termine assicurata sia da collaborazioni consolidate con istituzioni di ricerca italiane e straniere e da un adeguato cofinanziamento.



Collaborazioni e committenti

Dipartimento di Chimica –Università del Piemonte Orientale-Dipartimento di Chimica –Università di Urbino -Dipartimento di Microbiologia – Università di Ferrara -Dipartimento di Chimica 'G. Ciamician', Università di Bologna-Dipartimento di Chimica Applicata e Scienza dei Materiali, Università di Bologna-Dipartimento di Ingegneria dei Materiali – Università di Ancona-IPEN, Sao Paulo, Brasile-Dipartimento di Scienze Farmaceutiche - Università di Padova

Finalità

Obiettivi

Caratterizzazione chimico-fisica di nano/microsfere polimeriche con tecniche spettrofotometriche, elettroforetiche e di diffusione dinamica con luce laser (PCS, ZP); - Caratterizzazione termodinamica, dinamico- meccanica, termica (DSC, TGA) di materiali polimerici;- Cinetiche di polimerizzazione con tecniche fotoDSC, FTIR in tempo reale, fotoreologica di materiali polimerici termo e foto-indurenti - Ottenimento di manufatti o di film per la semina di linee cellulari

Risultati attesi nell'anno

purificazione e caratterizzazione chimico-fisica di nanosfere polimeriche per il rilascio di biomolecole modelloCorrelazioni proprietà struttura di poliesteri alifatici biodegradabili contenuti atomi di zolfo in catena Polimeri fotoreticolati per applicazioni avanzate e relativo trasferimento tecnologicoMessa a punto di matrici polimeriche per la crescita cellulare nuove metodologie di sintesi e di caratterizzazione su materiali polimerici in fase solida e in soluzione pubblicazioni scientifiche

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell' istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
486	76	136	622

importi in migliaia di euro



Polimeri, compositi e nanostrutture con proprietà funzionali programmate

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per i materiali compositi e biomedici (IMCB)
Sede svolgimento attività:	Napoli (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Eugenio Amendola

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 5 di cui Ricercatori: 3

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Alessandra Aldi	VI	Roberto De Santis	III	Marino Lavorgna	III
Luigi Ambrosio	I	Luigi De Vito	VII	Maria Rosaria Marcedula	VI
Eugenio Amendola	II	Cira Formicola	VI	Mario Montanino	III
Vincenza Antonucci	III	Marta Giamberini	III	Rodolfo Morra	VI
Mariarosaria Bonetti	VI	Michele Giordano	III	Mariano Pracella	II
Assunta Borzacchiello	III	Francesco Greco	III	Francesca Segreti	VI
Gianfranco Carotenuto	III	Salvatore Iannace	II	Fabio Tricoli	VII

Temi

Tematiche di ricerca

Studio dei fattori controllanti la morfologia di nanocariche inorganiche in matrici polimeriche, modifica delle proprietà reologiche elongazionali in materiali per la produzione di schiume strutturali, studio dei meccanismi di trasporto di gas e vapori in membrane polimeriche, preparazione e caratterizzazione di film sottili di materiali organici ed inorganici per applicazioni optoelettroniche.

Stato dell'arte

Grandi sforzi di R&D sono rivolti alla progettazione ed alla caratterizzazione dei nuovi materiali, per adeguarne le proprietà ai requisiti. Tali materiali vanno ricercati in classi quali: a) nanocompositi, b) materiali superstrutturati e strutture intelligenti c) materiali ottenuti da fonti rinnovabili e biodegradabili. La ricerca relativa allo sviluppo di materiali innovativi deve necessariamente tenere conto dello studio delle correlazioni tra processo, materiali e proprietà del manufatto.

Azioni

Attività in corso

- messa a punto di sistemi polimerici ibridi nanostrutturati con proprietà termiche avanzate per applicazioni strutturali nel settore automobilistico;
- studio di materiali macromolecolari con proprietà strutturali avanzate quali ad esempio schiume polimeriche per imballaggio, fibre liquido cristalline per microattuatori, sviluppo di membrane selettive per il packaging alimentare;
- studio di sistemi macromolecolari per applicazioni ecosostenibili.

Azioni da svolgere e punti critici

Si precisa che nel Piano di Riparto delle spese/costi figurativi Accentrati è stato inserito nelle tipologie di spesa alla riga affitti un importo pari a €239301 che riflette la somma del nuovo contratto di fitto a partire dal 01-01-2005 e il vecchio contratto che scade il 31-12-2004. Per tale



motivo risulta un residuo di € 49367 nella colonne delle spese da ripartire. Non si prevedono per il momento particolari punti critici per le attività, oggetto della commessa.

Collaborazioni e committenti

Sono in corso collaborazioni di ricerca con: Università di Napoli "Federico II", Università di Salerno, Centro Ricerche Fiat, ENEA, Centro di Cultura per le Materie Plastiche di Alessandria, ST Microelectronics.

Finalità

Obiettivi

identificazione di un sistema ibrido nanostrutturato per applicazioni nel settore automobilistico; - sviluppo di sistemi polimerici multicomponente basato su criteri di ecoprogettazione. - progettazione di materiali con proprietà di trasporto selettive. - sviluppo di sistemi polimerici per applicazioni optoelettroniche. Competenze: Sintesi di sistemi macromolecolari, caratterizzazione chimico-fisica, meccanica, reologica e morfologica, preparazione di film sottili.

Risultati attesi nell'anno

Sono previste pubblicazioni scientifiche e/o brevetti e la realizzazione di dimostratori prototipali per i seguenti obiettivi: sistema polimerico ibrido nanostrutturato basato su matrici poliestere termoplastiche; membrane polimeriche selettive; film polimerici per optoelettronica.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
834	447	93	928

importi in migliaia di euro



Progettazione mirata di Materiali Macromolecolari ad Architettura Controllata e/o Nanostrutturati per un Utilizzo Funzionale

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio delle macromolecole (ISMAC)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Maria Carmela Sacchi

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 36 di cui Ricercatori: 19

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Marco Gabriele Armanini	IV	Vittoria Crosignani	IV	Valeria Pucci	VII
Paolo Barbieri	VI	Giovanni Dondero	IV	Massimo Ragazzi	II
Natalina Bergamini	V	Fabrizio Forlini	III	Arnaldo Rapallo	III
Fabio Bertini	III	Alberto Giacometti Schieroni	V	Giovanni Ricci	III
Laura Boggioni	III	Salvatore Italia	V	Maria Carmela Sacchi	II
Aldo Boglia	IV	Mario Izzo	VII	Paola Stagnaro	III
Palmira Bonassi	IV	Paolo Locatelli	I	Marco Striseo	VII
Emilio Bonsignore	II	Raniero Mendichi	III	Francesca Tarchi	VII
Davy Cam	VII	Riccardo Passera	IV	Vincenzo Trefiletti	IV
Maurizio Canetti	IV	Franco Pioli	IV	Incoronata Tritto	II
Elena Castoldi	VII	Daniele Piovani	V	Giulio Zannoni	IV
Bianca Barbara Cavazza	II	Augusto Provasoli	II		
Giovanna Costa	II	Francesco Provasoli	IV		

Temi

Tematiche di ricerca:

L'attività sarà articolata in 5 Work Package (WP) WP1 Sintesi di nuovi catalizzatori single site metallocenici e post- metallocenici WP2 Sintesi di omo- co- e ter-polimeri di olefine cicloolefine e diolefine WP3 Sviluppo di materiali nanostrutturati a base poliolefinica e non WP4 Caratterizzazione dei nuovi sistemi polimerici e modellistica molecolare WP5 Sviluppo di materiali multicomponenti e/o nanocompositi a base di polimeri sintetici e naturali per applicazioni specifiche

Stato dell'arte

Solo i polimeri sono in grado di soddisfare la crescente domanda di materiali ad alta specializzazione e flessibilità d'uso e lavorazione, a basso costo e con impatto ambientale controllabile, e vasta gamma di applicazioni. La produzione mondiale di materiali polimerici ha superato i 180 milioni di tonnellate (oltre il 60% costituito da poliolefine). Le applicazioni vanno dagli elastomeri, ai materiali per l'imballaggio, alle membrane e ai materiali per l'elettronica e la telecomunicazione.

Azioni

Attività in corso

Nel campo della catalisi, della sintesi e della caratterizzazione microstrutturale, chimico-fisica e delle proprietà meccaniche e di superficie delle macromolecole e dei materiali da esse ottenibili, sono in corso, presso i "Bacini di Competenze" coinvolti in questa Commessa (ISMAC- Milano e Genova; ICCOM-Firenze e ICTP-Napoli) le attività di ricerca programmate e descritte nei Programmi triennali e annuali del CNR, ordinate nel 2004 anche secondo "Macrolinee".



Azioni da svolgere e punti critici

Punto critico generale è l'incertezza relativa alla consistenza e sviluppo del capitale umano necessario alle attività proposte, per il ridotto inserimento di giovani ricercatori negli ultimi quindici anni. Un punto critico particolare riguarda la prolungata, parziale operatività del laboratorio di spettroscopia NMR di ISMAC-Milano, in relazione all'attesa (14 anni) della conclusione dei lavori e dell'attivazione della nuova sede di ISMAC-Milano. GIUSTIFICAZIONE FINANZIAMENTO RICHIESTO: 1- Trasferimento nel 2005 di ISMAC-Milano in nuova sede e riattivazione dei Laboratori; 2- Trasporto e riattivazione di n. 4 Spettrometri NMR (ISMAC-Milano);

Collaborazioni e committenti

Partners di: -Strategic Targeted Research Projects "Designed Nanostructured Hybrid Polymers: Polymerization Catalysis and Tecton Assembly" (NANOHYBRID)(UE FP6-Priorità 3) -FSE Regione Lombardia 'Materiali poliolefinici ad alta riciclabilità per imballaggio alimentare e farmaceutico-biomedicale' -UE Progetto LIFE Environment Industrie: BASELL-FE; TICONA-GmbH (D); ITP Ind. Termoplastica Pavese- PV, Novamont-NO, Polyeur-BN, Pirelli-MI, Elasis-NA Università di Genova,Pavia, Pisa

Finalità

Obiettivi

Nuovi materiali a base di polimeri sintetici e polimeri naturali per imballaggio, elastomeri e applicazioni ingegneristiche Nanoparticelle e nanocompositi, ibridi termoplastici ad alta barriera, alta stabilità dimensionale e migliore termoconducibilità e termoresistenza Sviluppo metodologie di caratterizzazione e metodi teorici per lo studio di proprietà dei polimeri Sviluppo di catalizzatori Sintesi di omo- e copolimeri Preparazione di nanocompositi Caratterizzazione e modellistica

Risultati attesi nell'anno

Catalizzatori anche nanostrutturati per la sintesi di poli-olefine, - cicloolefine e -diolefine a struttura polimerica controllata (2005-2006) - Omo- e copolimeri "taylor made" a base poliolefinica, materiali nanostrutturati a base di Nylon 6,PET,polimeri naturali per film da imballaggio(2005-2006) - Copolimeri a blocchi polari/apolari e cristallini/amorfi per nanoibridi polimerici stabilizzati da legami chimici (2005-2007) - Tecniche computazionali di modellistica

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)

Luogo di svolgimento attività: Firenze (FI)

Istituto esecutore: Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri (ICTP)

Luogo di svolgimento attività: Arco Felice (NA)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
2.491	631	579	3.070

importi in migliaia di euro



Sintesi di nuove membrane artificiali anche con proprietà catalitiche proprietà di trasporto, separazioni molecolari

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la tecnologia delle membrane (ITM)
Sede svolgimento attività:	Arcavacata di Rende (CS)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Enrico Drioli

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 9 di cui Ricercatori: 6

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Catia Algieri	III	Alessandra Criscuoli	III	Anna Rosa Gugliuzza	III
Iolanda Apa	VII	Giorgio De Luca	III	Johannes Carolus Jansen	III
Giuseppe Barbieri	III	Laura Donato	III	Anna Nigri	VII
Angelo Bruno Basile	III	Alberto Figoli	III	Franco Tasselli	III
Alfredo Cassano	III	Lidietta Giorno	III	Adalgisa Tavolaro	III
Gabriele Clarizia	III	Amalia Gordano	III	Elena Tocci	III

Tem

Tematiche di ricerca:

Tra le principali attività da svolgere vi sono quelle previste dai progetti di ricerca finanziati dall'EU, dal MIUR, da gruppi privati, etc. Queste attività riguardano gli ulteriori sviluppi delle attività in corso al fine di migliorare le proprietà di trasporto dei componenti di interesse e, per le membrane catalitiche, anche le proprietà di reattività e selettività verso i prodotti di reazione desiderati.

Stato dell'arte

A livello globale, le membrane rivestono già un interesse significativo che via via sta crescendo sia a livello della grande industria che di quella farmaceutica, della chimica fine e di base. In particolare, la caratteristica di intervenire a livello molecolare consente separazioni avanzate, senza l'impiego di solventi, né cambiamenti di fase, con basso consumo energetico, senza aggiunta di additivi chimici, etc.

Azioni

Attività in corso

Preparazione e caratterizzazione di membrane piane e tubolari (capillari e fibre cave): - polimeriche anche catalitiche applicate nella separazione/purificazione di CO₂, H₂, di enantiomeri chirali, succhi alimentari, etc. in separatori, emulsificatori, contattori, cristallizzatori, reattori a membrana - zeolitiche anche catalitiche per separazioni e reazioni (per es., CO clean-up di H₂ per celle a combustibile) ad alta temperatura; - ibride (polimero-zeolite) - a base di nanotubi di carbonio

Azioni da svolgere e punti critici

La preparazione di membrane è una delle attività che ITM svolge da tempo (con risultati di rilevanza internazionale) e continuerà a svolgere in particolare nei settori di maggiore interesse per applicazioni industriali, farmaceutiche, biotecnologiche, biomedicali, ecc. La disponibilità diretta di strumenti quali, per es. SEM, TEM, darebbero ulteriore impulso alle ricerche. Infatti, al



momento, analisi di questo tipo sono realizzate, in coll. con strutture universitarie o del CNR esterne all'ITM

Collaborazioni e committenti

Tra le principali collaborazioni in atto vi sono quelle con le Università di Genova, Padova, Ferrara, Foggia, Torino, Namur (Belgio), con il Politecnico di Milano, con Istituti di ricerca anche esteri quali il KRICT (Corea del Sud), il TIPS (Russia), aziende quali la GVS (Bologna), la P&G, IITS Artea, la Solvay (Milano), Enti quali l'EPA (Environmental Protection Agency), etc. L'ITM è presente in NanoMemPro, Network of Excellence della EU con altri 12 Istituzioni e numerose aziende europee.

Finalità

Obiettivi

I principali obiettivi riguardano la preparazione e caratterizzazione di membrane con proprietà di permeazione e selettività sempre maggiore per varie applicazioni (vedi "attività in corso"). Le principali competenze richieste dalla presente commessa, già presenti nell'ITM, riguardano la conoscenza dei metodi di preparazione delle diverse tipologie di membrane anche catalitiche, della loro caratterizzazione morfologica e delle loro proprietà di trasporto.

Risultati attesi nell'anno

I principali risultati attesi sono la preparazione di membrane con proprietà di permeazione e selettività sempre maggiore per varie applicazioni (vedi "attività in corso"). Lo sviluppo temporale delle diverse attività di preparazione di membrane va da uno a due a tre anni secondo quanto previsto dai diversi progetti di ricerca in corso e finanziati o co-finanziati da strutture esterne all'ITM.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.338	890	244	1.582

importi in migliaia di euro



Sintesi di polimeri e progettazione di sistemi polimerici innovativi ad elevate prestazioni per lo sviluppo ecosostenibile

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri (ICTP)
Sede svolgimento attività:	Arco Felice (NA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Mario Malinconico

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 20 di cui Ricercatori: 10

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Luciano Amelino	IV	Anna Esposito	VII	Giustino Orefice	VIII
Maurizio Avella	II	Patrizia Ferraro	VII	Francesco Palumbo	IV
Pietro Buono	V	Emanuele Fiore	VI	Anna Principe	V
Luigi Calandrelli	VII	Barbara Immirzi	III	Maria Raimo	III
Sossio Cimmino	II	Rosa Iovinelli	VII	Gennaro Romano	IV
Loredana D'orazio	III	Antonio Lahoz	VII	Antonietta Russo	VIII
Pasquale De Luca	VIII	Paola Laurienzo	III	Roberto Russo	III
Diana De Rosa	VII	Roberta Maietta	VII	Ennio Scafora	IV
Vincenzo Di Liello	V	Mario Malinconico	II	Gennaro Scarinzi	III
Maria Laura Di Lorenzo	III	Carlo Mancarella	IV	Clara Maria Silvestre	III
Emilia Di Pace	III	Giuseppe Narciso	V	Achille Tagliatela	IV
Maria Emanuela Errico	III	Raffaele Nazzaro	VII		

Temi

Tematiche di ricerca:

Sintesi di nuovi polimeri biomedicali o otticamente attivi. Sviluppo di materiali da fonti rinnovabili a basso costo e loro miscele o anche in mescola con poliolefine per agricoltura, calzaturiero, tessile, imballaggi sostenibili, come compositi fibrosi per edilizia. Progettazione e realizzazione di termoindurenti con sistemi catalitici ecologici. Determinazione delle proprietà funzionali dei materiali ottenuti con particolare attenzione ai problemi interfacciali in miscele, compositi e nanocompositi

Stato dell'arte

L'evoluzione nel campo dei materiali funzionali e delle relative tecnologie di produzione consente di intervenire in profondità sulla struttura della materia per produrre sistemi progettati per specifici impieghi e soluzioni a più elevate prestazioni. L'attuale tendenza della ricerca macromolecolare è sempre più rivolta alla progettazione ed al controllo delle complessità di nuovi materiali che integrano i polimeri per impartire proprietà elettroniche, ottiche, biomediche, di sostenibilità.

Azioni

Attività in corso

Progettazione e realizzazione di: Materiali polimerici per l'imballaggio, l'agricoltura e l'edilizia (riciclabilità o rinnovabilità delle materie prime). Sistemi a base polimerica innovativi per l'energia sostenibile (produzione di idrogeno) e per la salute dell'uomo (polimeri biomedicali). Materiali polimerici per i settori automobilistico (riciclo) e aeronautico (sistemi micro e nano strutturati). Materiali per il tessile (ignifugazione) ed il calzaturiero (confort e sostenibilità)



Azioni da svolgere e punti critici

SI considera l'attività altamente realizzabile, stante la richiesta di innovazione che proviene dal mondo industriale per fronteggiare con la qualità dei prodotti la competizione perdente sui costi. La criticità riguarda la disponibilità di forze giovani sia per la ricerca che per il supporto tecnologico, al fine almeno di rimpiazzare il turnover.

Finalità

Obiettivi

Ottenere nuovi materiali da fonti rinnovabili o biodegradabili. Migliorare le proprietà di materiali riciclati. Integrare polimeri e cariche o nanocariche mediante mirati interventi interfacciali. Sviluppare nuovi processi sintetici o di miscelazione mirati all'ottenimento di materiali innovativi. Trasferire le conoscenze acquisite al sistema imprese

Risultati attesi nell'anno

Nuovi polimeri per biomedicale o per ottica guidata (si completa nel triennio) Nuovi materiali (leghe, compositi, nanocompositi) per lo sviluppo sostenibile (si completa nel triennio) Sviluppo di metodologie di indagine di sistemi complessi con particolare riferimento ai fenomeni interfacciali (si completa nel triennio) Realizzazione di sistemi di trasferimento dell'innovazione nel settore dei materiali sostenibili

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.300	615	54	1.354

importi in migliaia di euro



Sviluppo Conoscenze

Descrizione generale

Progetto: Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca: Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore: Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri (ICTP)
Sede svolgimento attività: Arco Felice (NA)
Dip. di prevista afferenza: Progettazione Molecolare
Responsabile indicato: Cosimo Carfagna

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca

Stato dell'arte

Azioni

Attività in corso

Azioni da svolgere e punti critici

Collaborazioni e committenti

Finalità

Obiettivi

Risultati attesi nell'anno

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
151	0	0	151

importi in migliaia di euro



Sviluppo e caratterizzazione di materiali polimerici biocompatibili e/o biodegradabili di origine sintetica e naturale

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione mirata di macromolecole con proprietà strutturali, di barriera e di biocompatibilità e di materiali micro e meso porosi con proprietà di trasporto
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica e tecnologia dei polimeri (ICTP)
Sede svolgimento attività:	Catania (CT)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Concetto Puglisi

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca

Stato dell' arte

Azioni

Attività in corso

Azioni da svolgere e punti critici

Collaborazioni e committenti

Finalità

Obiettivi

Risultati attesi nell' anno

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell' istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
2.286	1.308	0	2.286

importi in migliaia di euro





Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche

Descrizione obiettivi generali

Progettare e realizzare nuovi e più efficienti catalizzatori eterogenei ed omogenei da impiegarsi in settori di importanza strategica per lo sviluppo sostenibile.

numero commesse	numero moduli	personale equivalente tempo pieno	
		ricercatori	totale
6	9	46	61

Istituti esecutori

Chimica dei Composti Organo-Metallici
Scienze e Tecnologie Molecolari
Sintesi Organica e la Fotoreattività
Studio dei Materiali Nanostrutturati
Tecnologia delle Membrane

Sintesi dei risultati attesi

(da revisionare a cura dei comitati ordinatori)

Miglioramento e progressiva conoscenza in settori di importanza strategica per lo sviluppo sostenibile: catalizzatori per produzione e purificazione di idrogeno, celle a combustibile a bassa temperatura, materiali microporosi, nanoporosi e nanoparticellari, catalizzatori per l'oleochimica e catalizzatori per l'ossidazione del metano a bassa temperatura, catalizzatori per la desolfurazione di combustibili fossili sia per via riduttiva sia ossidativa.

Risorse complessive del triennio

Le risorse da impegnare per questo progetto nel triennio sono:

anno	risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
	A	B	C	D = A + C
2005	6,27	1,24	0,23	6,50
2006	6,13	1,34	0,23	6,36
2007	5,96	1,43	0,23	6,19

valori in milioni di euro



Catalizzatori per l'abbattimento di inquinanti atmosferici

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati (ISMN)
Sede svolgimento attività:	Palermo (PA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Anna Maria Venezia

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca

"La commessa "Nanostrutture per catalisi", che si inserisce nell'ambito del progetto 3, mira all'ottenimento di materiali ad elevata attività e selettività catalitica per reazioni di interesse ambientale quali: abbattimento di sostanze inquinanti; elettrocatalizzatori per celle a combustibile (FC) e catalizzatori per chimica fine che contribuiscano a processi chimici "puliti". "

Stato dell'arte

"SINTESI DI catalizzatore per NO + CO o CH_x per condizioni di alimentazione magra; ossidazione totale del metano su Co/CeO₂ e Co/CeO₂/ZrO₂; Au/ossidi per PROX; AuCo/ossidi, AuPd/ossidi per HDS e HDA di aromatici contenenti zolfo; stronzio ferriti drogate come catodi per FC a conduzione di ossigeno; bario cerati come elettroliti solidi nelle FC a conduzione protonica; catalizzatori regio/enantioselettivi; sistemi porfirinici per catalisi asimmetriche. ANALISI STRUTTURALE E DI SUPERFICIE "

Azioni

Attività in corso

"La catalisi contemporanea deve avere un ruolo positivo nella società moderna come strumento per la eliminazione degli agenti inquinanti e la realizzazione di processi puliti con una selettività del 100% ai prodotti desiderati. Problemi irrisolti sono: riduzione dei gas "serra" come CO, CH_x e NO_x e nocivi come particolato, aromatici e SO₂; combustione totale del metano; ottimizzazione delle FuelCell in termini di elettrodi e di H₂; sintesi "pulite" di sistemi policiclici e porfirinici"

Azioni da svolgere e punti critici

Obiettivo della commessa consiste nella realizzazione di catalizzatori attivi, selettivi e rigenerabili ed economicamente vantaggiosi. A tal fine verranno utilizzate competenze nell'ambito della sintesi, e della caratterizzazione delle proprietà di superficie e strutturali. Sono richieste competenze di spettroscopie fotoelettroniche e di diffrazione a raggi x. Inoltre viene previsto l'utilizzo di tecniche sofisticate come EXAFS, XANES con luce di sincrotrone e NMR per lo stato solido

Collaborazioni e committenti

"Sviluppo -di catalizzatori per la riduzione di NO_x con CO e con idrocarburi; -di catalizzatori per la idrogenazione degli aromatici e desolforazione; -dicatalizzatori per la ossidazione del metano; -di catalizzatori per la ossidazione selettiva del CO in presenza di idrogeno; -di elettrodi per FC; -di sistemi porfirinici nella catalisi asimmetrica e ambientale; -di catalizzatori per sintesi chemo regio e stereoselettiva di sistemi policiclici di interesse biologico."

Finalità

Obiettivi

La commessa coinvolge rapporti di collaborazione con numerosi Istituti di ricerca Italiani e stranieri e mondo industriale quali: Dipt. di Chimica, Palermo Dipt. di Ingegneria dei Materiali di Messina, Dipt. di Chimica di Ts Istituto CNR -ITAE, Me IENI-Pd, ISMN-Bo, ICCOM-Fi ISTM-Mi



Dipt. Chimica, Valencia, Spagna Hungarian Academy of Science, BUDAPEST Bulgarian Academy of Science, SOFIA ENI Tecnologie, San Donato Centro Ricerche FIAT UMR 7611 Paris VI, CNRS

Risultati attesi nell'anno

Il risultato atteso della commessa consiste nello ottenimento di catalizzatori attivi e selettivi e economicamente vantaggiosi rispetto alle soluzioni attuali del mercato PER OGNI ATTIVITA DELLA COMMESSA sintesi e caratterizzazione del materiale / 1-6 mesi tests catalitici di laboratorio /7-12 mesi pubblicazioni e report /13-24 mesi approccio con il mondo industriale ed eventuale trasferimento tecnologico /25-36

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
2.451	140	0	2.451

importi in migliaia di euro



Catalizzatori per la produzione chemo-, regio- e stereoselettiva di fine chemicals

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)
Sede svolgimento attività:	Pisa (PI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Giovanni Vitulli

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 7 di cui Ricercatori: 3

Elenco dei partecipanti

Pierluigi Barbaro	liv. III	Stefania Damiani	liv. VII	Fabio Migliacci	liv. IV
Carlo Bartoli	VI	Simonetta Donzellini	V	Werner Oberhauser	III
Francesco Biagiotti	VII	Giuliano Giambastiani	III	Paolo Pertici	II
Annabella Bianchi	II	Luca Gonsalvi	III	Maurizio Peruzzini	II
Claudio Bianchini	I	Dante Masi	IV	Massimo Santarelli	VIII
Marusca Bonaccini	IV	Carlo Mealli	I	Roberta Settambolo	III
Franco Cecconi	IV	Andrea Meli	II	Giovanni Vitulli	I
		Stefano Midollini	II	Fabrizio Zanobini	IV

Temi

Tematiche di ricerca

L'attività da svolgere prevede lo studio dei fattori che regolano la enucleazione degli atomi metallici nel processo di preparazione dei sistemi catalitici, sia omogenei che eterogenei, allo scopo di avere catalizzatori contenenti particelle metalliche di dimensioni programmate, specifici per la particolare reazione. Verrà anche studiata l'interazione delle particelle metalliche con leganti chinali, sia naturali che sintetici, per ottenere catalizzatori enantioselettivi.

Stato dell'arte

La catalisi chemo-, ed enantioselettiva promosso da catalizzatori a base di metalli di transizione riveste una notevole importanza, sia scientifica che economica. L'attività catalitica di particelle metalliche è strettamente collegata alle loro dimensioni; particelle molto piccole, di diametro medio sino a ca. 5nm, presentano una notevole attività e selettività legata sia alla loro elevata area superficiale sia a fattori elettronici.

Azioni

Attività in corso

L'Istituto ICCOM ha maturato in questi anni una notevole esperienza sulla preparazione di sistemi catalitici contenenti particelle metalliche nanostrutturate utilizzando vapori di metalli come reagenti, secondo una tecnica nota come "Metal Vapour Synthesis"

Azioni da svolgere e punti critici

Il programma richiede una valutazione immediata della concentrazione del metallo nei solvatati, attraverso analizzatori ad assorbimento atomico non disponibili in sede. E' inoltre indispensabile migliorare le prestazioni del reattore con un più efficace sistema di pompaggio ed una migliore coibentazione della camera di reazione.

Collaborazioni e committenti

Università di Torino (Prof. Cosuccia), Università di Milano (Prof. Ragaini), IRMERC-CNR di Arcavacata di Rende (Dr. Basile), Università di Roma la Sapienza (Prof.ssa Russo).



Finalità

Obiettivi

Preparazione di prodotti di rilevanza in chimica fine mediante reazioni quali la idrogenazione catalitica selettiva di composti organici polifunzionali, la idrogenazione di areni sostituiti, l'idroformilazione e sililformilazione di substrati olefinici ed acetilenici.

Risultati attesi nell'anno

Individuazione dei fattori che regolano le aggregazioni di atomi metallici (fase vapore) nei solvatati metallo-legante organico (fase liquida) e nella disposizione su supporti (fase solida). Successiva preparazione mirata di catalizzatori a più alta attività e selettività.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Luogo di svolgimento attività: Milano (MI)

Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)

Luogo di svolgimento attività: Bologna (BO)

Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane (ITM)

Luogo di svolgimento attività: Arcavacata di Rende (CS)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
4.027	110	64	4.092

importi in migliaia di euro



Elettrocatalizzatori a base di metalli della prima serie di transizione, o a bassissimo contenuto di platino, per fuel cells alimentate ad idrogeno o ad alcool diretto

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)
Sede svolgimento attività:	Firenze (FI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Francesco Vizza

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 6 di cui Ricercatori: 2

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Pierluigi Barbaro	III	Stefania Damiani	VII	Fabio Migliacci	IV
Carlo Bartoli	VI	Simonetta Donzellini	V	Simonetta Moneti	III
Francesco Biagiotti	VII	Giuliano Giambastiani	III	Werner Oberhauser	III
Annabella Bianchi	II	Andrea Ienco	III	Maurizio Peruzzini	II
Claudio Bianchini	I	Dante Masi	IV	Massimo Santarelli	VIII
Marusca Bonaccini	IV	Carlo Mealli	I	Francesco Vizza	II
Franco Cecconi	IV	Andrea Meli	II		

Temi

Tematiche di ricerca

Sintesi organica (polimeri tempranti per la coordinazione di metalli; sintesi di monomeri per ionomeri) - sintesi inorganica (riduzione dei metalli per la produzione di nanoparticelle ad alta distribuzione) - funzionalizzazione di polimeri a base olefinica anche fluorurata con tecniche electron-beam e radiazioni gamma. - Caratterizzazione dei materiali - Valutazione della mezza cella - valutazione della MEA e della cella monoplanare - Sviluppo di hardware di cella.

Stato dell'arte

La crescente domanda di energia è alla base dell'interesse nelle celle a combustibile (FC). Per le FC a bassa temperatura il limite più importante è costituito dal fatto che il platino, elemento essenziale nei catalizzatori noti, è scarso in natura e pertanto troppo costoso, ed anche inefficace con gli omologhi superiori del metanolo (es. etanolo, zuccheri). Solo elettrocatalizzatori più attivi e a base di metalli non nobili potrà permettere la diffusione delle FC.

Azioni

Attività in corso

L'Istituto ha sviluppato (5 brevetti nel 2004) in collaborazione con industrie del settore una tecnologia unica nel settore degli elettrocatalizzatori per FC a base di Fe, Co, Ni ed altri metalli non nobili. Ha inoltre sviluppato un notevole know-how per la preparazione di membrane polimeriche a scambio anionico, di MEA e di hardware di cella.

Azioni da svolgere e punti critici

Lentezza nel processo di caratterizzazione dei catalizzatori per la mancanza di un microscopio elettronico TEM in alta risoluzione a Firenze ed in Toscana. Poco personale con background in elettrochimica e con esperienza nella caratterizzazione di materiali nanostrutturati. Finanziamenti nazionali ed internazionali adeguati.



Collaborazioni e committenti

ISTM-CNR di Milano (Dr. Psaro), Acta SpA, Università di Trieste (Prof. Graziani), Università di Roma la Sapienza (Prof. Scrosati), Università di Pisa (Prof. Ciardelli), ITAE-CNR.

Finalità

Obiettivi

Catalizzatori privi di platino o a bassissimo contenuto di platino per elettrodi di FC ad idrogeno e a combustibile diretto, preferibilmente etanolo e carboidrati. – membrane a scambio anionico capaci di funzionare senza degradazione a temperature superiori a 90 C. – MEA e hardware di cella. Sintesi organiche ed inorganiche. Nanotecnologie. Caratterizzazione (IR, NMR, TEM, SEM, elettrochimica, porosimetria, etc).

Risultati attesi nell'anno

Il know-how in nostro possesso ci permetterà di avere in 6 mesi almeno 4-5 catalizzatori anodici e catodici e almeno due nuove membrane polimeriche. Alla fine dell'anno avremo prototipi di cella monoplanare self-breathing ad idrogeno o ad etanolo diretto capaci di erogare potenze di 15-30 mw/cm².

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Luogo di svolgimento attività: Milano (MI)

Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane (ITM)

Luogo di svolgimento attività: Arcavacata di Rende (CS)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
3.204	235	66	3.270

importi in migliaia di euro



Modellistica chimica e sue applicazioni

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Gianluigi Casalone

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 8 di cui Ricercatori: 4

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Olivia Bizzarri	VI	Giuseppina Indaco	VII	Maria Grazia Vecchio	II
Laura Cartechini	III	Francesco Mercuri	III	Giuseppe Vitillaro	II
Filippo De Angelis	III	Costanza Miliani	III		
Simona Fantacci	III	Paola Rocchi	V		

Temi

Tematiche di ricerca

L'attività più rilevante da svolgere nell'ambito della caratterizzazione sperimentale riguarderà lo studio mediante diffrazione di raggi X di sistemi supramolecolari e l'implementazione dei metodi di simulazione degli spettri di risonanza paramagnetica elettronica. Nel settore della modellistica computazionale l'attività riguarderà l'implementazione di codici di chimica computazionale su piattaforme ad alte prestazioni e il loro utilizzo per lo studio dei sistemi in esame.

Stato dell'arte

La modellistica molecolare è uno strumento d'indagine usato in modo massiccio nella chimica, nella fisica, nella biologia e nella scienza dei materiali in quanto consente di descrivere un sistema chimico (molecole, supramolecole, nanosistemi) in modo completo attraverso la simulazione e la determinazione di alcune sue proprietà fondamentali quali la struttura geometrica, l'energetica e il comportamento reattivo.

Azioni

Attività in corso

Analisi multipolare della densità elettronica ottenuta da dati di diffrazione di raggi X; studio con spettrometria di massa di proteine e macromolecole d'interesse biomedico; studio di spettri di eccitazione e ionizzazione; caratterizzazione strutturale e reattività di sistemi di interesse nel campo della chimica atmosferica; reattività di frammenti inorganici e organometallici di interesse in catalisi; spettroscopie di risonanza magnetica elettronica per lo studio di materiali nanostrutturati.

Azioni da svolgere e punti critici

Il pieno raggiungimento degli obiettivi previsti richiede però ulteriori risorse di calcolo e l'acquisizione di personale a contratto.

Collaborazioni e committenti

Alcune delle attività di ricerca sono svolte in collaborazione con gruppi di altissimo livello scientifico riconosciuto in campo internazionale. Tra essi ricordiamo in particolare l'Università di Aarhus, Danimarca; il Politecnico di Milano, Italia; il NASA Ames Research Center di Moffett Field, California, USA; l'Università di Heidelberg, Germania; l'Università di Princeton, USA; l'Università di Amsterdam, Olanda; l'Università di Melbourne, Australia e il Politecnico di Zurigo, Svizzera.



Finalità

Obiettivi

Obiettivo generale è simulare le proprietà e predire il comportamento di sistemi molecolari di rilevante interesse chimico e di viva attualità al fine di progettare sistemi molecolari con le proprietà desiderate. Le competenze del personale CNR e di quello universitario associato sono eccellenti come testimoniato anche dalla partecipazione a progetti europei e nazionali. Il know-how esistente è competitivo ed adeguato alla sfida internazionale, pur sussistendo una sofferenza di massa critica.

Risultati attesi nell'anno

Si prevedono risultati di rilievo soprattutto nella determinazione della struttura cristallina di vari composti chimici e nello studio con spettrometria di massa di specie ioniche e composti di interesse biomedico. In ambito teorico si prevedono risultati rilevanti nella dinamica di processi catalitici; nello studio dei meccanismi di reazione nella chimica dell'atmosfera; nello studio delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche di materiali ibridi.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.694	317	0	1.694

importi in migliaia di euro



Nuovi catalizzatori per 'commodities'

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Gianluca Pozzi

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 3 di cui Ricercatori: 2

Elenco dei partecipanti

	liv.
Matteo Guidotti	III
Gianluca Pozzi	III
Maria Nicoletta Ravasio	II

Temi

Tematiche di ricerca

Verranno ottimizzate le condizioni di idrogenazione selettiva in modo da aumentare al massimo la produttività dei processi. Verrà studiato l'effetto della cristallinità e delle caratteristiche idrofiliche/idrofobiche del supporto sulla attività e selettività dei catalizzatori di epossidazione e verranno studiate reazioni acido e/o base catalizzate per la produzione di nuovi 'oleochemicals'.

Stato dell'arte

Il mercato dei prodotti derivati da oli vegetali è in continua espansione grazie alla loro biodegradabilità ed al prezzo delle materie prime. Tra i prodotti più studiati sono polimeri, lubrificanti, tensioattivi e combustibili (biodiesel). I principali ostacoli ad un utilizzo più ampio di oli a basso costo sono la loro instabilità all'ossidazione dovuta alla presenza di più insaturazioni nella molecola di acido grasso e la scarsa eco-compatibilità dei processi attuali.

Azioni

Attività in corso

Reazioni di idrogenazione selettiva su catalizzatori a base di rame che riducono il numero di doppi legami senza modificare il contenuto in componenti saturi e limitando l'isomerizzazione cis-trans e posizionale. Reazioni di epossidazione su catalizzatori eterogenei a base di titanio ancorato su solidi mesoporosi ordinati o amorfi. Studio di catalizzatori solidi acidi per l'esterificazione di acidi grassi e di basi organiche di tipo fluorous per la transesterificazione di trigliceridi.

Azioni da svolgere e punti critici

Necessità di rafforzare con personale a tempo determinato esperto nei seguenti settori: reazioni ad alta pressione in batch e flusso.

Collaborazioni e committenti

Stazione sperimentale oli e grassi Università di Bologna Centro di eccellenza CIMAINA

Finalità

Obiettivi

Messa a punto di trattamenti di idrogenazione selettiva di oli vegetali che ne aumentino la stabilità ossidativa mantenendo le proprietà a freddo e la viscosità. Messa a punto di processi di epossidazione in fase eterogenea alternativi ai processi via peracido generato in situ. Messa a punto di metodologie catalitiche innovative per la produzione di biodiesel. Competenze nell'analisi di miscele di acidi grassi e nel condurre reazioni sotto pressione.



Risultati attesi nell'anno

Deposito di un brevetto nel corso del prossimo anno. Messa a punto ed ottimizzazione di metodi catalitici innovativi nel campo degli "oleochemicals".

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)

Luogo di svolgimento attività: Firenze (FI)

Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane (ITM)

Luogo di svolgimento attività: Padova (PD)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
2.683	79	0	2.683

importi in migliaia di euro



Nuovi materiali per produzione, purificazione e 'storage' di idrogeno

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di molecole e sistemi nanostrutturati con proprietà catalitiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Rinaldo Psaro

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 6 di cui Ricercatori: 3

Elenco dei partecipanti

	liv.
Vladimiro Dal Santo	III
Rinaldo Psaro	I
Laura Sordelli	III

Temi

Tematiche di ricerca

Preparazione, caratterizzazione e screening di catalizzatori Rh-supportati nanodispersi. Mantenendo il catalizzatore Rh/alfa-Al₂O₃ preparato a partire dal cluster carbonile Rh₄(CO)₁₂ come sistema di riferimento, si studierà l'impiego di altri supporti (ZrO₂, MgO) e di altri precursori organometallici di Rh, adatti sia per l'impregnazione da soluzioni sia per la deposizione via CVD. Questi composti devono essere alternative più vantaggiose rispetto al precursore carbonilico di rodio.

Stato dell'arte

L'ossidazione parziale di metano come via per la produzione di H₂ è stata già ampiamente studiata in letteratura. Di notevole interesse applicativo è stata la recente scoperta che elevate conversioni di metano con alte selettività a CO e H₂ possono essere ottenute conducendo l'ossidazione parziale anche a tempi di contatto di pochi millisecondi ad elevate temperature. In queste condizioni operative non convenzionali le più elevate selettività ad idrogeno sono state osservate impiegando catalizzatori a base di Rh.

Azioni

Attività in corso

In alternativa al catalizzatore industriale, è in corso la messa a punto di una tecnica preparativa di catalizzatori Rh-supportati a partire da più economici precursori organometallici quale: Rh(acac)(CO)₂. Esso è versatile poichè è stabile all'aria, ha una buona volatilità a basse temperature, che lo rende adatto alla tecnica chemical vapour deposition (CVD), inoltre è solubile in molti solventi organici comuni e quindi è adatto anche per l'impregnazione via soluzione.

Azioni da svolgere e punti critici

Eccessiva lentezza nell'acquisizione di misure di microscopia elettronica ad alta risoluzione dei catalizzatori Rh-supportati nanodispersi per mancanza di una adeguata strumentazione a Milano e in Lombardia. Necessità di rafforzare con personale a tempo determinato esperto nei seguenti settori: reattoristica e scale-up.

Collaborazioni e committenti

ITM-CNR ICCOM-CNR Elettra Spa Centro di Eccellenza CIMAINA Politecnico di Milano
Università di Milano Università di Bologna Stazione Sperimentale per i Combustibili



Finalità

Obiettivi

Il miglioramento della comprensione dei diversi aspetti (natura del precursore di Rh, effetto delle interazioni con il supporto, influenza delle tecnica preparativa) che concorrono all'ottenimento di catalizzatori Rh-supportati con distribuzione nanometrica del Rh. Sviluppo di tecniche preparative e di catalizzatori nanostrutturati a base di Rh. Competenze in nanoscienze nella preparazione di catalizzatori del tipo nanoparticella supportata su ossidi inorganici.

Risultati attesi nell'anno

Ottenimento di catalizzatori Rh-supportati con distribuzione nanometrica del metallo, che siano altamente attivi nella reazione di ossidazione parziale di idrocarburi leggeri per la produzione di syngas e stabili nelle condizioni severe di temperatura che si instaurano in condizioni adiabatiche di processo.

Potenziale impiego:

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)

Luogo di svolgimento attività: Firenze (FI)

Istituto esecutore: Istituto per la tecnologia delle membrane (ITM)

Luogo di svolgimento attività: Arcavacata di Rende (CS)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
3.130	363	0	3.130

importi in migliaia di euro





Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche

Descrizione obiettivi generali

Definire metodi progettuali per creare materiali multifunzionali nanostrutturati lavorabili con tecnologie "soft" per la realizzazione di nuovi dispositivi.

numero commesse	numero moduli	personale equivalente tempo pieno	
		ricercatori	totale
7	5	69	105

Istituti esecutori

Chimica dei Composti Organo-Metallici
Chimica Inorganica e delle Superfici
Materiali Compositi e Biomedici
Scienze e Tecnologie Molecolari
Sintesi Organica e la Fotoreattività
Studio dei Materiali Nanostrutturati
Studio delle Macromolecole

Sintesi dei risultati attesi

(da revisionare a cura dei comitati ordinatori)

Realizzazione di materiali multifunzionali, nanostrutturati lavorabili con tecnologie "soft"; fabbricazione non convenzionale di sensori chimici, biologici e per la diagnostica; costruzione di nuovi dispositivi applicabili in elettronica e in microelettronica. Organizzazione di molecole funzionali in sistemi gerarchicamente definiti (design chimico a livello molecolare e controllo dell'organizzazione).

Risorse complessive del triennio

Le risorse da impegnare per questo progetto nel triennio sono:

anno	risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
	A	B	C	D = A + C
2005	11,43	3,66	0,92	12,35
2006	11,17	3,94	0,92	12,09
2007	10,86	4,21	0,92	11,78

valori in milioni di euro



Componenti molecolari, supramolecolari o macromolecolari con proprietà fotoniche ed optoelettroniche

Descrizione generale

Progetto: Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche

Tipologia di ricerca: Progetti a carattere strategico

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Sede svolgimento attività: Milano (MI)

Dip. di prevista afferenza: Progettazione Molecolare

Responsabile indicato: Silvio Quici

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 13 di cui Ricercatori: 10

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Sara Alocci	VII	Marco Cavazzini	III	Tullio Pilati	II
Mario Barzaghi	II	Giuseppe Filippini	II	Alessandro Ponti	III
Maria Bellini	VII	Alessandra Forni	III	Gianluca Pozzi	III
Anna Berlin	II	Carlo Gatti	II	Silvio Quici	I
Riccardo Bianchi	II	Maria Angela Gussoni	II	Raffaella Soave	III
Silvia Bradamante	II	Elena Lucenti	III		
Fausto Cargnoni	III	Giovanni Mezza	IV		
Gianluigi Casalone	I	Fabio Enrico Penotti	III		

Tem

Tematiche di ricerca:

Progettazione e sintesi di molecole organiche policoniugate con risposte NLO fotomodulabili per memorie elettriche e ottiche riscrivibili o per NLO switches. Sintesi di sistemi eterociclici come gruppi elettronattrattori ed elettrondonatori capaci di emissione indotta per assorbimento di due fotoni (TPA). Sintesi di strutture dendritiche con cromofori fotonici da usare come collettori d'energia e ottimizzazione dei processi di trasferimento d'energia studiati con tecniche risolte nel tempo.

Stato dell'arte

La progettazione e la sintesi di materiali funzionali nanostrutturati, (con proprietà ottiche ed elettriche) o multifunzionali, per autoaggregazione molecolare con perfetto controllo strutturale e funzionale "bottom-up" è un campo di ricerca in continua espansione nei laboratori di tutto il mondo e costituisce un modo innovativo per lo sviluppo delle nanotecnologie e per la costruzione di dispositivi con dimensioni <100 nm difficilmente ottenibili mediante miniaturizzazione "top-down".

Azioni

Attività in corso

Sintesi di cromofori molecolari e loro funzionalizzazione per l'ottenimento di materiali nanostrutturati NLO attivi mediante autoaggregazione. Sintesi di chelanti azotati con sostituenti elettrondonatori e dei loro complessi metallici con significative risposte NLO del secondo e terzo ordine. Sintesi di complessi di ioni lantanoidei con proprietà emissive. Dispositivi elettrocromici basati su semiconduttori nanocristallini funzionalizzati e metallo polimeri luminescenti.

Azioni da svolgere e punti critici

La fattibilità del progetto è strettamente correlata alla entità del finanziamento che a sua volta determina la possibilità di implementare apparecchiature esistenti e/o sostituire quelle obsolete



con nuove e più moderne apparecchiature necessarie per la caratterizzazione chimica, strutturale e funzionale dei prodotti ottenuti. Non meno importante è la possibilità di reclutare giovani ricercatori con contratti a tempo determinato con borse di studio, assegni di ricerca e così via.

Collaborazioni e committenti

Le ricerche nella preparazione dei materiali nanostrutturati, mediante un approccio molecolare, con proprietà fotoniche ed optoelettroniche sono fortemente interdisciplinari pertanto, per il raggiungimento degli obiettivi, sono previste collaborazioni con molte università nazionali (soprattutto attraverso INSTM) ed internazionali, con altri dipartimenti del CNR ed eventualmente con le industrie interessate come per esempio ST Microelectronics e Pirelli Labs.

Finalità

Obiettivi

Sintesi mirata, mediante ingegneria molecolare e strutturale, di molecole organiche, composti di coordinazione e nanostrutture ibride organiche- inorganiche cristalline con elevate proprietà fotoemittenti, lineari o non lineari, e loro autoorganizzazione per dare materiali ibridi nanostrutturati con elevata stabilità termica e fotochimica, buona processabilità ed elevate proprietà ottiche. Competenze di modellizzazione e calcolo teorico, sintesi organica inorganica e organometallica.

Risultati attesi nell'anno

Queste ricerche dovrebbero portare, oltre che allo sviluppo di conoscenza scientifica di base, alla preparazione di materiali nanostrutturati e di dispositivi nanometrici per applicazioni fotoniche e optoelettroniche. Ottenimento di un notevole numero di lavori scientifici e brevetti ed ampia attività di formazione per giovani ricercatori. Sono anche prevedibili possibili azioni di "spin-off", per i prodotti con migliori prestazioni, in collaborazione con le imprese interessate.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Luogo di svolgimento attività: Bologna (BO)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.460	650	0	1.460

importi in migliaia di euro



Dispositivi per spintronica a base di strutture ibride organico-inorganico e semiconduttori magnetici diluiti

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati (ISMN)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Valentin Dediu

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca:

"Trasporto spin polarizzato all'interfaccia ferromagnetico-organico; proprietà elettriche, magnetiche e ottiche di dispositivi ibridi organico-inorganico con elettrodi spin polarizzati; crescita e caratterizzazione di film di ossidi magnetici (manganite, magnetite); crescita e caratterizzazione di film di metalli magnetici; proprietà magneto-ottiche dei film magnetici e delle strutture ibride; crescita di diversi film di ossidi, nitrucci e carburi con la tecnica pulsed plasma deposition."

Stato dell'arte

"Messa a punto sistema di crescita e caratterizzazione di strutture ibride ferromagnetico-organico comprendente deposizione a flussi molecolari di materiali organici, deposizione ossidi ferromagnetici con Pulsed Plasma Deposition, deposizione metalli normali e ferromagnetici; messa a punto di un sistema di spettroscopia magneto-ottica risolta in tempo (nanosecondi); messa a punto del sistema ALE di crescita GaAs drogato con manganese; necessità di un sistema microscopio tunnel spin polarizzato"

Azioni

Attività in corso

"Scoperta (brevetto) magnetoresistenza forte nei dispositivi manganite-organico-manganite; osservati effetti spettrali nuovi nei OLED con elettrodi spin polarizzati; film di manganite di alta qualità su diversi substrati; film di magnetite di alta qualità su substrati inorganici; film magnetite ferromagnetici su strati organici; forte polarizzazione degli spin nei film di manganite a temperatura ambiente; elaborati metodi di controllo della polarizzazione spin alla superficie dei film di manganite"

Azioni da svolgere e punti critici

"processi di iniezione e trasferimento di spin nei semiconduttori organici; studio delle interfacce ferromagnetico-organico; la deposizione di film di GaMnAs via MOVPE con concentrazioni di Mn superiori a quelle ottenute finora; studi micro Raman, magneto-ottici (MOKE) e di magnetoresistenza in campi fino a 7 T; fabbricazione diversi dispositivi organico-inorganico con due e tre elettrodi spin polarizzati: valvole a spin, OLED con elettrodi spin polarizzati, transistori FET spin polarizzati"

Collaborazioni e committenti

"Studi valvole a spin con diversi elettrodi ferromagnetici e diversi semiconduttori organici; studi proprietà spettrali e efficienza di OLED con uno o due elettrodi spin polarizzati; crescita film magnetici e organici; miglioramento della qualità magnetica e strutturale di film di magnetiti su substrati organici; caratterizzazioni magneto-ottiche (Kerr) di qualità magnetica dei film e di trasporto spin attraverso i semiconduttori organici; magnetoresistenza e effetto Hall su film magnetici."



Finalità

Obiettivi

Collaborazioni scientifiche con: più di 20 Università italiane e commesse CNR, Wurzburg University, Linköping University, Twente University, Nijmegen University, Mons University, Cambridge University, Oxford University, IMEC (Belgium), University of Utah (USA), South Florida University (USA), Los Alamos National Laboratory (USA), Fudan University (Shanghai); Collaborazioni industriali con: Organic Spintronics, Cambridge Display Technology, Thales, Philips

Risultati attesi nell'anno

magnetoresistenza nelle spin valve ibride orizzontali e verticali; controllo magnetico delle proprietà spettrali di OLED con elettrodi spin polarizzati; film metallici ferromagnetici su substrati organici; film di ossidi ferromagnetici sui substrati organici con proprietà magnetiche robuste a temperatura ambiente; messa a punto di misure magneto-ottiche time resolved per lo studio del trasporto spin polarizzato nei semiconduttori organici; crescita dei film ceramici con Pulsed Plasma Deposition

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica inorganica e delle superfici (ICIS)

Luogo di svolgimento attività: Padova (PD)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
686	490	0	686

importi in migliaia di euro



Materiali Funzionali Organici per applicazioni High-Tech: sistemi molecolari, supramolecolari e bioibridi (MAFO-HT)

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Giovanna Barbarella

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 17 di cui Ricercatori: 10

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Marco Ballestri	V	Laura Favaretto	V	Paolo Samori	III
Giovanna Barbarella	II	Massimo Gazzano	III	Giovanna Sotgiu	III
Nadia Camaioni	III	Alessandro Geri	IV	Luisa Tondelli	III
Massimo Capobianco	III	Maurizio Ghirardelli	VIII	Alessandro Venturini	III
Giuseppe Casalbore Miceli	II	Patrizia Giorgianni	IV	Massimo Zambianchi	V
Roberta Chiodini	VIII	Daniela Lughì	VI	Alberto Zanelli	III
Roberto Cortesi	VII	Anita Manderioli	IV		
Roberto Degli Esposti	IV	Silvana Roda	V		

Temì

Tematiche di ricerca:

- 1) Modellistica molecolare e simulazioni
- 2) Sintesi di materiali organici coniugati
- 3) Sintesi di materiali funzionali di ispirazione biologica
- 4) Sviluppo di metodologie per la preparazione di micro e nanostrutture funzionali.
- 5) Caratterizzazioni strutturali
- 6) Caratterizzazioni funzionali
- 7) Self-assembly nello stato solido
- 8) Sviluppo di metodologie per la marcatura fluorescente di biopolimeri

Stato dell'arte

Lo sviluppo di materiali organici capaci di esercitare funzioni quali il trasporto di cariche elettriche o l'emissione di luce richiede la sintesi di strutture molecolari variamente complesse e il controllo delle loro proprietà di autoorganizzazione. Il dominio dei processi che consentono l'espressione di una certa funzione nello stato solido (condizione in cui operano i dispositivi a base organica) è attualmente il focus della ricerca internazionale sui materiali multifunzionali.

Azioni

Attività in corso

Calcoli teorici relativi a proprietà singole e collettive di composti organici
Sintesi di oligomeri e polimeri coniugati, di composti metallorganici e di biopolimeri
Caratterizzazioni chimiche e strutturali, inclusi metodi diffrattometrici e microscopie a scansione
Fabbricazione di prototipi di dispositivi per caratterizzazioni elettriche ed elettroottiche
Marcatura di biopolimeri con molecole fluorescenti



Azioni da svolgere e punti critici

Maggior punto critico è l'incertezza di risorse umane e finanziarie. Il gruppo già si procura molte risorse attraverso la partecipazione a progetti di ricerca nazionali ed internazionali. Impossibile, però, sopperire a bisogni quali strumentazione di rilievo soltanto attraverso l'accesso a progetti limitati nel tempo. È inoltre impensabile che la ricerca possa essere condotta con profondità e continuità solo con personale precario e contratti a breve termine.

Collaborazioni e committenti

Istituti Area di Ricerca CNR di Bologna Dipartimento CNR Materiali e Dispositivi Partners internazionali progetti UE Univ. Bologna, Dip. Chimica G. Ciamician e Dip. Biotecnologie Univ. Piemonte orientale, Dip. Scienze e Tecnologie Avanzate Univ. Bari, Dip. di Chimica e di Fisica Istituto Superiore di Sanità Consorzio Interuniversitario Nazionale Metodologie e Processi Innovativi di Sintesi (CIMPIS) Industrie

Finalità

Obiettivi

Preparazione di:

- semiconduttori organici per applicazioni in campo (opto)elettronico e per la rivelazione fluorogena o elettrica di biopolimeri
 - materiali funzionali coniugati e bioibridi per studi di self-assembly nello stato solido.
- Competenze da utilizzare: esperienza in calcolo teorico/ sintesi organica e bioorganica/ caratterizzazione strutturale di cristalli, polveri e film organici/ caratterizzazione delle proprietà elettriche e (opto)elettroniche di film sottili

Risultati attesi nell'anno

Dopo 12 mesi: preparazione di semiconduttori organici p, n e ambipolari anche emettitori di luce; caratterizzazioni elettriche ed elettroottiche.

Dopo 24 mesi: ottimizzazione delle relazioni struttura molecolare/ proprietà funzionali/ morfologia.

Dopo 36 mesi: preparazione di semiconduttori bioibridi buoni trasportatori di carica; realizzazione di dispositivi per la rivelazione fluorogena e/o elettrica di biopolimeri.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica dei composti organo metallici (ICCOM)

Luogo di svolgimento attività: Bari (BA)

Istituto esecutore: Istituto di chimica inorganica e delle superfici (ICIS)

Luogo di svolgimento attività: Padova (PD)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
960	300	219	1.179

importi in migliaia di euro



Materiali Polimerici Compositi e Nanostrutture per Optoelettronica, Fotonica e Relativi Dispositivi

Descrizione generale

Progetto: Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche

Tipologia di ricerca: Progetti a carattere strategico

Istituto esecutore: Istituto per lo studio delle macromolecole (ISMAC)

Sede svolgimento attività: Milano (MI)

Dip. di prevista afferenza: Progettazione Molecolare

Responsabile indicato: Alberto Bolognesi

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 12 di cui Ricercatori: 6

Elenco dei partecipanti

Marco Gabriele Armanini	liv. IV	Marinella Catellani	liv. II	Raniero Mendichi	liv. III
Natalina Bergamini	V	Vittoria Crosignani	IV	Mariacecilia Pasini	III
Aldo Boglia	IV	Elisabetta De Salvia	VI	Riccardo Passera	IV
Alberto Bolognesi	II	Silvia Maria Destri	II	Daniele Piovani	V
Palmira Bonassi	IV	Alberto Giacometti Schieron	V	William Umberto Porzio	II
Chiara Botta	III	Salvatore Italia	V	Francesco Provasoli	IV
Davy Cam	VII	Mario Izzo	VII	Valeria Pucci	VII
Maurizio Canetti	IV	Paolo Locatelli	I	Pietro Secondi	IV
Elena Castoldi	VII	Silvia Luzzati	III	Francesca Tarchi	VII

Temi

Tematiche di ricerca:

- WP1)Modelling,processi di sintesi di monomeri/polimeri per l'elettronica,optoelettronica e fotonica,ottimizzazione protocolli di polimerizzazione
- WP2)Caratterizzazione molecolare,strutturale,elettroottica,termica, metodologie di caratterizzazione molecolare
- WP3)Architetture supramolecolari nanometriche
- WP4)Dispositivi optoelettronici
- WP5)Polimeri superstrutturati per sensori molecolari
- WP6)Polimeri per microelettronica
- WP7)Dispositivi per fotonica, ottica non-lineare

Stato dell'arte

L'industria microelettronica rappresenta una fetta consistente dell'economia globale. In questo settore, in continua evoluzione, c'è una forte domanda di nuovi materiali con migliorate prestazioni, con processing a basso costo basato sull'auto-organizzazione su scala nanometrica per prodotti dalle funzioni innovative. I polimeri coniugati, a basso ed alto peso molecolare, rispondono a queste esigenze e trovano già impiego in numerosi settori della microelettronica avanzata.

Azioni

Attività in corso

- 1) Modellazione e sintesi dei materiali: polimeri coniugati a basso/alto peso molecolare per applicazioni in optoelettronica, fotonica, microsistemi
- 2) Caratterizzazione molecolare, strutturale, elettrica, spettroscopica ottica ed ottica non lineare dei materiali



- 3) Organizzazione dei materiali in strutture supramolecolari nanorganizzate semplici o complesse con differenti tecniche
- 4) Realizzazione e test di prototipi di dispositivi e/o microsistemi

Azioni da svolgere e punti critici

I punti critici:

- Stabilità nel tempo dei materiali preparati: questa non è ancora prevedibile, con sufficiente precisione, a priori
- Scarso controllo della dispersione delle masse molecolari che può portare ad un basso livello di organizzazione supramolecolare

Condizioni di fattibilità :

- Rapido accesso al finanziamento ed alla reperibilità di borse di studio su cui attivare la commessa
 - Coordinamento con i gruppi con cui si intende collaborare
- GIUSTIFICAZIONE FINANZIAMENTO RICHIESTO:**

- 1- Trasferimento nel 2005 di ISMAC-Milano in nuova sede e riattivazione dei Laboratori;
- 2- Trasporto e riattivazione di n. 4 Spettrometri NMR (ISMAC-Milano);

Collaborazioni e committenti

Collaborazioni all'interno della commessa fra i gruppi che la compongono. Si realizzeranno collaborazioni con la commessa 2 e 4 dello stesso progetto per la messa a punto di protocolli di sintesi e purificazione di monomeri e/o polimeri e per la caratterizzazione spettroscopica e strutturale su scala nanometrica delle strutture supramolecolari. Collaborazioni con Università Italiane e Straniere nell'ambito dei progetti in corso

Finalità

Obiettivi

- i) Sintesi di nuovi polimeri coniugati con proprietà elettroottiche, fotoniche.
- ii) Caratterizzazione molecolare, strutturale, elettronica, ottica lineare e non, elettrica .
- iii) Organizzazione delle strutture molecolari a basso/alto peso molecolare.
- iv) Prototipi di dispositivi Competenze Modelling, Sintesi, Analisi strutturale, Gel Permeation Chromatography, Misure elettriche, Spettroscopia Elettroottica, Analisi termica, Controllo struttura supramolecolare.

Risultati attesi nell'anno

- i) Modelli di strutture polimeriche e/o copolimeriche.
- ii) Nuovi materiali polimerici e copolimerici a basso e alto peso molecolare con migliorate proprietà elettroottiche, fotoniche, elettriche, termiche
- iii) Film sottili con nuove architetture supramolecolari nano/microorganizzate per la preparazione di dispositivi optoelettronici e fotonici.
- iv) Preparazione e testing di dispositivi optoelettronici, fotonici e microsistemi con diversa architettura

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto per i materiali compositi e biomedici (IMCB)
Luogo di svolgimento attività: Napoli (NA)



Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
819	396	299	1.118

importi in migliaia di euro



Nanotecnologie di materiali multifunzionali

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati (ISMN)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Fabio Biscarini

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 10 di cui Ricercatori: 5

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Maria Grazia Balestri	V	Franco Dinelli	III	Jean Francois Moulin	III
Fabio Biscarini	III	Chiara Dionigi	III	Patrizia Zecchi	IV
Giuseppe Marcello Cacace	II	Laura Favero	III		
Massimiliano Cavallini	III	Paolo Mei	VI		

Tem

Tematiche di ricerca:

NANOSTRUTTURAZIONE: patterning di semiconduttori e dielettrici organici in 2 e 3D; dewetting di film sottili.

NANOFABBRICAZIONE: processi assistiti da stampi e templati; microfluidica.

DISPOSITIVI: transistor organici a film ultrasottile; biosensori a base di nanotubi di C; fotovoltaico organico.

SVILUPPO DI TECNOLOGIA: costruzione di UHV-LT AFM; misure elettriche/AFM in HV; robot per nanofabbricazione.

PROPRIETA: fenomeni dinamici di complessi.

Stato dell'arte

Le nanotecnologie sono rivolte alla realizzazione di materiali, dispositivi e sistemi funzionali basati sul controllo delle proprietà su scale spaziali dei nanometri. Materiali multifunzionali (molecolari, polimerici, ibridi, biologici), progettati per l'auto-assemblamento, sono unità costruttive per nanofabbricazione di tipo bottom-up. Occorre sviluppare una piattaforma tecnologica di questo tipo, che sia rivolta a nuovi prodotti ed applicazioni sostenibili.

Azioni

Attività in corso

Nanomateriali: semiconduttori organici; nanosfere, nanotubi di carbonio (CNT); superfici funzionalizzate per riconoscimento biomolecolare; moti molecolari governati da interazioni non covalenti. **Nanofabbricazione:** integrazione di nanostrutture in dispositivi; ossidazione anodica parallela; crescita su templati. **Dispositivi:** FET a film sottile e a fibrille; fotovoltaico. **Strumentazione:** UHV-STM, EFM, MFM, SKPM; misure elettriche in HV; Spettrometri MW per fasci supersonici.

Azioni da svolgere e punti critici

- 1) Messa in funzione del ciclo completo di prototipazione matrici e stampi;
- 2) EBL funzionante;
- 3) approvvigionamento componenti per strumentazione home-built;
- 4) dimostrazione di dispositivi e sistemi funzionali;
- 5) risorse umane adeguate per 11 progetti.



Collaborazioni e committenti

Materiali multifunzionali: CNR-ISOF, Univ. Libre Bruxelles, Techn. Univ. Eindhoven, KUNjmegeen, Max Planck Inst. Mainz, CSIC-ICMAB Barcelona, Univ. Cambridge, Avecia, Merck, Univ. Firenze Transistor organici: Philips Res. Labs. Eindhoven, STMicroelectronics Catania, Univ. Wuerzburg, IMEC Leuven Prototipazione: ST, INFM-S3 MO, INFM-TASC TS, INFM-NNL LE Spintronica: CNEA Strumentazione: UNIBO, SACMI, CSIC Madrid Misure strutturali: CNRS Strasbourg, Risoe Denmark, UNIBO Modeling: UNIBO

Finalità

Obiettivi

NANOSTRUTTURAZIONE: controllo spaziale di materiali multifunzionali su superfici e ambienti confinati.

NANOFABBRICAZIONE: processi sostenibili, prototipazione.

DISPOSITIVI: nanofabbricazione di transistor, bio-sensori, memorie.

SVILUPPO DI TECNOLOGIA: a) strumentazione per caratterizzazione e fabbricazione;
b) piattaforma tecnologica.

PROPRIETA' DI MATERIALI: fenomeni dinamici su scale molecolari, nanometriche e mesoscopiche. Competenze: multidisciplinari.

Risultati attesi nell'anno

NANOSTRUTTURAZIONE: fibrille, strisce, nanosfere; film ultrasottili di dielettrici a M4; **NANOFABBRICAZIONE:** inizio di attività di prototipazione per EBL M4; controllo dimensionale sotto i 200 nm M6.

DISPOSITIVI: transistor organici a mobilità $> 0.1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ M6; biofunzionalizzazione di CNT M9; nanosfere binarie M6.

SVILUPPO DI TECNOLOGIA: inizio UHV-LT AFM M6; misure elettriche in situ M3, inizio robot M10.

PROPRIETA': energetica, struttura ed interazioni in sistemi molecolari.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.392	1.216	208	1.600

importi in migliaia di euro



Sistemi molecolari e prodotti funzionali

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)
Sede svolgimento attività:	Padova (PD)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Gian Giacomo Facchin

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Elenco dei partecipanti

Temi

Tematiche di ricerca:

Nell'ambito della sintesi metallorganica di complessi impiegabili in processi catalitici o adatti come precursori molecolari per prodotti funzionali, le ricerche riguardano:

- i) complessi di metalli di transizione (neutri e ionici, contenenti leganti isonitrili, carbonili, alchini, diazoalcani e carbenici) in reazioni di formazione di nuovi legami chimici;
- ii) sistemi molecolari quali derivati fosfazenici funzionalizzati con gruppi in grado di coordinare metalli di transizione.¹

Stato dell'arte

La sintesi metallorganica di complessi di metalli di transizione attraverso procedure anche innovative e la loro caratterizzazione chimico-fisica richiedono consistenti finanziamenti e impiego di risorse umane. Ciò è indispensabile per raggiungere una massa critica adeguata e per promuovere scambi scientifici con realtà di ricerca nazionali e straniere.

Azioni

Attività in corso

L'attività di ricerca ha coinvolto la progettazione, la sintesi e la caratterizzazione spettroscopica di composti metallorganici attraverso la coordinazione di substrati organici insaturi e non (nitrili, isonitrili, alchini, olefine, monossido di carbonio, ilidi, etc) e la loro attivazione all'attacco da parte di nucleofili ed elettrofili.

Azioni da svolgere e punti critici

La rilevanza dell'approccio metallorganico si basa sulla possibilità di modulare la reattività di molecole organiche di varia complessità coordinate ad un centro metallico. A seconda della natura di quest'ultimo e dei leganti ancillari possono essere favoriti cammini di reazione che procedono attraverso intermedi di energia minore consentendo di indirizzare la reazione verso la formazione del prodotto desiderato. Caratterizzazioni mirate porteranno a definire le condizioni di sintesi ottimali.

Collaborazioni e committenti

Attivazione di leganti isonitrilici per coordinazione a centri metallici (Au, Cr, W, Pt,..). Tale attivazione è estendibile in generale a vari altri leganti organici e consente la sintesi di sistemi, per esempio eterociclici, difficilmente ottenibili mediante sintesi organica tradizionale e impiegabili per lo sviluppo di prodotti funzionali. Funzionalizzazione di polimeri fosfazenici contenenti gruppi ossidrilici con diazoderivati recanti sostituenti alchilici da varia natura.



Finalità

Obiettivi

Le collaborazioni si svolgeranno prevalentemente con il Dipartimento di Processi Chimici della Facoltà di Ingegneria dell'Università di Padova, col Dipartimento di Tecnologie Industriali dell'Università di Trento e con l'Istituto Superiore Tecnico dell'Università di Lisbona (Portogallo).

Risultati attesi nell'anno

Preparazione e messa a punto di processi di sintesi di complessi di metalli di transizione (Co, Cu, Ag, Au, Pd, Pt,..) contenenti leganti attivabili (isonitrili, carbonili, leganti insaturi, beta-dichetonati..) in seguito a coordinazione sul centro metallico. Sviluppo di sistemi molecolari quali precursori per prodotti funzionali (derivati fosfazenici e silani contenenti gruppi in grado di coordinare centri metallici).

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
133	0	0	133

importi in migliaia di euro



Dispositivi multifunzionali avanzati basati su nanostrutture organiche e ibride e loro investigazione mediante sonde ottiche non convenzionali

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione di strutture molecolari - supramolecolari - macromolecolari e di sistemi nanoorganizzati con proprietà elettriche, fotoniche o magnetiche
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati (ISMN)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Michele Muccini

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Elenco dei partecipanti

Temi

Tematiche di ricerca:

L'attività di ricerca è svolta nel contesto internazionale della fotonica e dell'elettronica organica e ibrida. Le tematiche specifiche su cui siamo impegnati coordinando iniziative europee riguardano l'elettronica e l'optoelettronica molecolare. Lo studio e la realizzazione di dispositivi multifunzionali non convenzionali rappresenta una delle tematiche di punta della commessa essendo elemento fondante per lo sviluppo di piattaforme di nanoelettronica ed optoelettronica integrata.

Stato dell'arte

Le principali azioni da svolgere per raggiungere gli obiettivi riguardano l'implementazione di un avanzato sistema per la fabbricazione e caratterizzazione dei dispositivi in ambiente controllato (condizioni combinate di HV e atmosfera con < 1ppm di ossigeno e acqua). Gli elementi di criticità risiedono principalmente nell'ottimizzazione delle prestazioni dei materiali attivi. Questi aspetti verranno affrontati anche beneficiando di collaborazioni internazionali.

Azioni

Attività in corso

Fotodiodi, fotoricettori, celle solari e illuminatori basati su nanostrutture organiche e ibride sono promettenti alternative a basso costo ai dispositivi tradizionali. Recentemente il CNR-ISMN ha realizzato i primi transistor ambipolari emettitori di luce (LET) I LET, oltre ad essere il primo esempio di dispositivi organici realmente multifunzionali, rappresentano anche una promettente strategia per realizzare display a matrice attiva e laser organici pompati elettricamente.

Azioni da svolgere e punti critici

1. Design e fabbricazione di dispositivi multifunzionali avanzati (LET, laser), fotodiodi e fotoricettori basati su sistemi organici e ibridi;
2. Ingegnerizzazione di nanostrutture con proprietà elettroniche, fotoniche ed optoelettroniche in dispositivi non convenzionali con tecniche OMBD e tecnologie da soluzione;
3. Correlazione tra le proprietà chimico-fisiche dei materiali alla nanoscala (determinate con sonde ottiche nanoscopiche) e le caratteristiche dei dispositivi multifunzionali;

Collaborazioni e committenti

L'attività in corso è focalizzata sullo studio delle proprietà dei materiali nanostrutturati organici e ibridi finalizzato al controllo delle caratteristiche elettroniche, fotoniche ed optoelettroniche dei dispositivi. Parallelamente si stanno realizzando prototipi di dispositivi quali celle solari, illuminatori e transistor ad effetto di campo emettitori di luce. L'ingegnerizzazione delle componenti attive dei dispositivi avviene con tecniche di deposizione in ultra alto vuoto.



Finalità

Obiettivi

'Collaborazioni scientifiche: IBM, Zurich (CH); IMEC, Leuven (B); AMO GmbH, Aachen (D); Philips-Eindhoven (NL); 3 Dag-Zurich (CH); Exitech-Oxford (UK); Centro Ricerche Plastoptica, Amaro (UD); CSEM- Zurich (CH); Università di Cambridge (UK); CNR-ISOF, CNR-IMEM; INSTM – Milano, Firenze, Catania, Padova; Università di Milano; Università dell'Insubria, Como; Università di Bologna; Università di Parma; Sincrotrone di Trieste; CNR Dipartimento Materiali e Dispositivi
Committenti: ELECTROLUX S.p.A. '

Risultati attesi nell'anno

Nell'anno in corso i risultati attesi riguardano la realizzazione di dispositivi multifunzionali a base organica con prestazioni che superino lo stato dell'arte. In particolare, si intendono realizzare transistor emettitori di luce con caratteristiche di trasporto di carica ambipolare bilanciata e con valori di mobilità di $10^{-1} \text{ cm}^2/\text{VS}$ (paragonabili cioè a quelle del silicio amorfo). Ci si attende inoltre di raggiungere valori di efficienza di generazione di luce paragonabile a quella dei LED.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
820	609	0	820

importi in migliaia di euro



Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce

Descrizione obiettivi generali

Costruire e controllare, anche grazie all'impiego di metodologie chimiche innovative, superfici ed interfacce anche a livello di scala nanometrica.

numero commesse	numero moduli	personale equivalente tempo pieno	
		ricercatori	totale
8	1	61	117

Istituti esecutori

Inquinamento Atmosferico
Chimica Inorganica e delle Superfici
Metodologie Chimiche
Scienze e Tecnologie Molecolari
Sintesi Organica e la Fotoreattività
Studio dei Materiali Nanostrutturati

Sintesi dei risultati attesi

(da revisionare a cura dei comitati ordinatori)

Costruzione e controllo, tramite idoneo impiego di metodologie chimiche innovative, di superfici ed interfacce anche a livello di scala nanometrica. Funzionalizzazione mirata delle superfici per applicazioni in elettronica, in biosensoristica, in applicazioni tribologiche e nella conservazione dei manufatti di interesse storico-artistico. Coatings antiusura a base di carburo e carbonitruro di titanio; sviluppo di liposomi con vettori di farmaci; ottimizzazione e trasferimento di un processo mecano-chimico su un prototipo di impianto industriale e sviluppo di uno strumento NMR unidirezionale portatile.

Risorse complessive del triennio

Le risorse da impegnare per questo progetto nel triennio sono:

anno	risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
	A	B	C	D = A + C
2005	12,48	2,36	1,07	13,55
2006	12,20	2,54	1,07	13,26
2007	11,86	2,72	1,07	12,93

valori in milioni di euro



Aspetti chimico fisici dei processi fondamentali

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati (ISMN)
Sede svolgimento attività:	Roma (RM)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Cesaro Stelluccia Nunziante
Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno):	14 di cui Ricercatori: 7

Elenco dei partecipanti

	liv		liv		liv
Michele Alagia	III	Daniela Ferro	II	Oriana Simonetti	VIII
Bruno Brunetti	III	Nadia Fichera	VII	Claudio Veroli	V
Giorgio Cappuccio	II	Yeghis Keheyan	III		
Pier Luigi Cignini	II	Cesaro Stelluccia Nunziante	II		

Temi

Tematiche di ricerca:

Produzione di idrogeno, sia mediante ossidazione dell' ilmenite, che mediante un ciclo reattivo solfo-iodio, con utilizzo di SO₂ e I₂. Studio termodinamico e spettroscopico dell' interazione Me-H₂ (Me=Pb, Au) per confermare l' esistenza di nuove specie molecolari. Crescita di film di composti intermetallici mediante PVD Caratterizzazione magnetica ed elettrochimica: come elettrodi a bassa sovratensione per produzione di H₂ da elettrolisi di soluzioni acquose; come elettrodi per celle Ni

Stato dell' arte

Contributo alla crescente domanda di creazione di nuove funzionalità e performances specifiche, fornendo la completa conoscenza dei materiali coinvolti e la esauriente caratterizzazione dei meccanismi di reazione a cui partecipano, sia nel processo di trasporto e deposizione da fase vapore che nell' interazione solido-gas, e/o mediante la caratterizzazione strutturale di polveri micro- e nano-cristalline e film-sottili anche nelle fasi intermedie di preparazione.

Azioni

Attività in corso

Produzione e caratterizzazione termodinamica e spettroscopica di intermetallici binari e alogenuri di terre rare. Studio di processi di riduzione dell' ilmenite con agenti riducenti di varia forza e sua ossidazione con vapor d' acqua per produrre idrogeno. Produzione e caratterizzazione di film e rivestimenti biocompatibili e interfacce MeC/MeO₂. Fotodissociazione di radicali. Sviluppo del primo prototipo di spettrometro 3D-imaging presso la beamline di sincrotrone fase gassosa ad Elettra.

Azioni da svolgere e punti critici

La fattibilità dipende dal mantenimento in efficienza delle grosse apparecchiature in dotazione mediante contratti di manutenzione; necessità di aggiornamento dello spettrometro di massa Patco e rifacimento del sistema di acquisizione; necessità di completamento di camera destinata allo studio di reazioni reattive gas-superficie; necessità di rinnovo assegni o contratti di collaboratori attualmente attivi (3 assegni, 1 borsa CNR, 1 contratto per tecnico)



Collaborazioni e committenti

Università: Roma1; Genova, Perugia, l'Aquila, Potenza, Catania; Osservatorio di Napoli; IMIP, Potenza; UNISANTIS, Ginevra, Svizzera; Inst. for Problems of Mat. Science, Ucraina; Inst. of Mat. Res., Slovacchia; ENEA Casaccia; LNF-INFN Frascati; Elettra, Trieste; Institute for Physical Chemistry of Ceramics, Mosca; Dept. of Material Science, University of Hokkaido, Sapporo, Giappone; Inst. for Roentgen Optics, Mosca; Soc. Lupi; ISTC; COST 529 e 531; Network Europeo FP5; INCO Copernicus.

Finalità

Obiettivi

Gli studi in corso hanno come obiettivo comune la esauriente definizione delle loro proprietà chimico-fisiche, la reattività, la conoscenza dei meccanismi di reazioni cui partecipano per avere un controllo su scala molecolare delle strutture ottenute. A tale scopo si utilizza una conoscenza di lunga tradizione di proprietà termodinamiche e spettroscopiche, sia di carattere sperimentale che teorico, cui si affiancano competenze di caratterizzazioni di micro- e nano-polveri, superfici e interfacce.

Risultati attesi nell'anno

L'attività di ricerca e l'ampliamento e lo sviluppo delle competenze della commessa forniranno dati sperimentali e teorici importanti per la realizzazione di nuovi materiali di interesse nella nanotecnologia. La massima diffusione dei risultati ottenuti dovrà cementare le già numerose collaborazioni esistenti e permettere una sempre maggiore partecipazione a progetti europei e nazionali e in prospettiva un più stretto contatto con il sistema imprenditoriale.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
702	68	36	738

importi in migliaia di euro



Metodologie chimiche innovative per lo sviluppo e la caratterizzazione di processi all'interfase superficiale

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di metodologie chimiche (IMC)
Sede svolgimento attività:	Monterotondo Scalo (RM)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Giancarlo Angelini

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 13 di cui Ricercatori: 8

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Giancarlo Angelini	I	Filippo Di Felice	VI	Ennio Italice Noviello	II
Zeineb Aturki	III	Franco Ebano	VII	Mariano Petrucci	VIII
Antonio Bertì	VIII	Salvatore Fanali	I	Valeria Piccioni	III
Enzo Brancaleoni	IV	Fiorella Fiorani	V	Chiara Polcaro	II
Roberto Bucci	IV	Massimiliano Frattoni	V	Pietro Ragni	III
Carmelo Cannarella	III	Fortunata Gallese	III	Aldo Rosati	V
Donatella Capitani	III	Giuseppe Laguzzi	II	Enrico Rossi	IV
Fabrizio Carnevaletti	V	Edo Lilla	V	Ezio Sbergamo	VII
Paolo Ciccio	I	Gaetano Lilla	IV	Anna Laura Segre	I
Daniilo Corradini	II	Loredana Luvidi	III	Vito Serio	II
Michele Cristalli	IV	Roberta Montanari	III	Raffaele Sestito	III
Pierluigi De Mico	V	Roberto Moscardelli	VI	Massimo Sinibaldi	I
Claudia Desiderio	III	Isabella Nicoletti	III	Ornella Ursini	III

Temì

Tematiche di ricerca:

Studio delle interazioni pi-greco mediante tutte le tecniche chimico- fisiche possibili. Saranno studiate nuove fasi a base di antibiotici glicopeptidici, proteine, ciclodestrine modificate sia a base di silice sia monolitiche. Verifica delle caratteristiche finali dei materiali metallici trattati con inibitori, a seguito di test di invecchiamento artificiale. Valutazione della attività enzimatica in funzione di: natura del supporto, natura chimica e distribuzione superficiale di attivazione.

Stato dell'arte

Si è dimostrato di poter formare aggregati molecolari stabilizzati da interazioni pi-greco. Sono state sintetizzate fasi chirali stazionarie modificando la silice con antibiotici glicopeptidici. Le fasi sono state impaccate in capillari ed utilizzate per la risoluzione chirale di composti di interesse farmaceutico, alimentare, ambientale. Mediante ciclotrone abbiamo prodotto radioisotopi per la valutazione dei processi di corrosione. Sono stati costruiti strumenti cromatografici.

Azioni

Attività in corso

Aggregati molecolari stabilizzati da interazioni pi-greco e idrofobiche Preparazione di nuove fasi e studio delle interazioni agente chirale- analita. Valutazione delle proprietà di inibitori di corrosione per impiego su materiali di interesse industriale. Metodologie di immobilizzazione chimica dell'enzima laccasi su superfici attivate di zeoliti. Costruzione di strumenti per la misura di metano in campo.



Azioni da svolgere e punti critici

La fattibilità del progetto dipenderà fortemente dalle fonti di finanziamento. Si ritiene inoltre critica la soddisfazione della richiesta di personale a tempo indeterminato nonché la conferma del personale che opera attualmente con contratti di ricerca.

Collaborazioni e committenti

Segre- UniRoma1, UniRoma3, Uni. British Columbia- Canada Fanali - Cyclolab, Budapest, Hungary; Tbilisi University, Georgia; Uni Bologna; Uni Chieti Laguzzi- Centro Sviluppo Materiali, Joint Research Centre, ILVA Sinibaldi- UniRoma1; Ist. Microbiologia, Praga-Repubblica Ceca; Charles Uni., Praga-Repubblica Ceca Desiderio- UniRoma1 Ciccioli- Università della Toscana

Finalità

Obiettivi

Caratterizzazione di aggregati pi-greco per simulare le interazioni membrana-acidi nucleici e membrana amino-acidi aromatici. Preparare capillari da utilizzare sia con tecniche cromatografiche sia elettroforetiche per studi di riconoscimento molecolare enantioselettivo e per applicazioni su campioni reali (biologici, farmaceutici ecc.) Sviluppo di nuovi inibitori di corrosione a basso impatto ambientale. Immobilizzazione chimica di enzimi: studio della stabilità, della velocità di disattivazione.

Risultati attesi nell'anno

Definizione di nuove classi di tensioattivi. Preparazioni di nuove fasi stazionarie chirali e non. Preparazione di capillari impaccati e monolitici. Selezione di nuove molecole per il trattamento di materiali metallici di interesse industriale. Determinazione della attività enzimatica, per l'enzima immobilizzato, per la trasformazione di alcune classi di inquinanti organici. Preparazione di colonne capillari monolitiche chirali e achirali per CEC e micro-HPLC

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.867	276	165	2.032

importi in migliaia di euro



Processi di polimerizzazione radicalica: polimerizzazione RAFT, applicazioni delle radiazioni ad alta energia e della spettroscopia ESR

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Angelo Alberti

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 14 di cui Ricercatori: 8

Elenco dei partecipanti

liv.		liv.		liv.		liv.	
Angelo Alberti	I	Andrea Dardani	VII	Silvano Lora	II		
Massimo Benaglia	V	Salvatore Emmi	II	Dante Macciantelli	IV		
Giovanni Braglia	V	Silvano Favaretto	V	Gianni Mancini	IV		
Mario Carezza	II	Piergiorgio Fuochi	II	Alessandro Martelli	II		
Alessandra Dall'olio	VI	Marco Lavalle	III	Angelo Monti	V		

Tem

Tematiche di ricerca:

Sintesi di agenti RAFT di nuova generazione, loro impiego in polimerizzazioni di monomeri mirati all'ottenimento di polimeri con proprietà specifiche e studi ESR di tali processi. Studi via radiolisi pulsata e spettrofotometria cinetica di polimerizzazioni di monomeri acrilici o epossidici e dell'effetto inibitore di ossigeno, alcoli e chinoni. Polimerizzazione radioindotta di monomeri funzionali o loro miscele nonché di IPNs a base di poli(idrossibutirrato con monomeri acrilici bifunzionali

Stato dell'arte

La polimerizzazione radicalica controllata (RAFT) è tematica di avanguardia nel settore dei polimeri ben definiti e la ricerca di nuovi CTA ne è un obiettivo prioritario. L'irraggiamento Electron Beam dei materiali ottenuti può poi migliorarne la stabilità termica, le proprietà isolanti, quelle meccaniche, e la resistenza all'abrasione. A loro volta i nanocluster rivestono notevole importanza come catalizzatori in fase liquida.

Azioni

Attività in corso

Viene investigata l'influenza di sostituenti sulla performance dei CTA di più vasto impiego e si svolgono studi ESR durante la polimerizzazione RAFT, si studia la preparazione radioindotta di composti a base di resine epossidiche e la caratterizzazione dei radicali cationi coinvolti nella polimerizzazione. Si studia inoltre la sintesi, mediante polimerizzazione indotta da raggi gamma di opportuni monomeri in fase liquida, di polimeri di tipo gel che abbiano effetto templante per i metalli.

Azioni da svolgere e punti critici

Una parte consistente dell'attività di ricerca comporterà l'uso dell'acceleratore LINAC in dotazione ad ISOF. Tale strumentazione necessita di interventi di manutenzione straordinaria per i quali sono già stati richiesti i finanziamenti adeguati. La completa disponibilità di tale strumentazione rappresenta quindi un punto critico per la fattibilità delle ricerche descritte.



Collaborazioni e committenti

Per lo svolgimento delle ricerche sopra descritte si prevedono collaborazioni sia in ambito nazionale che internazionale. In particolare queste coinvolgeranno: CSIRO, Australia; Politecnico, Milano; ENSICAEN, Francia; Facoltà di Ingegneria, Università di Palermo; Dipartimento di Chimica, Università di Bologna; Istituto degli Isotopi, Accademia delle Scienze Ungherese; Istituto Superiore di Sanità, Roma.

Finalità

Obiettivi

Individuazione di CTA più performanti, preparazione di films di oligomeri e polimeri atti con proprietà radiocromiche, sintesi radioindotta di polimeri gel e di Interpenetrating Polymer Networks (IPNs). Ci si avvarrà di conoscenze nell'uso delle radiazioni ad alta energia, della capacità di caratterizzare matrici polimeriche mediante lo studio nanomorfologici e dell'uso della spettroscopia ESR per la caratterizzazione di radicali e la determinazione di costanti di velocità delle loro reazioni.

Risultati attesi nell'anno

Il progetto si articola nel triennio 2005-2007. Nel primo anno si ritiene di poter portare a compimento la sintesi di nuovi CTA per il processo RAFT e determinare costanti di velocità per le reazioni in cui partecipano, ottenere polimeri gel atti alla dispersione di centri metallici e IPNs da utilizzare per il rilascio controllato di ormoni e chiarire i meccanismi della radiopolimerizzazione di monomeri acrilici ed epossidici nonché della inibizione da parte di agenti diversi.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.191	166	167	1.358

importi in migliaia di euro



Progettazione di Nuovi Precursori Molecolari per Nanosistemi e Ottimizzazione del Processo MOCVD per la Fabbricazione e/o Modifica delle Funzionalità delle Superfici

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica inorganica e delle superfici (ICIS)
Sede svolgimento attività:	Padova (PD)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Pierino Zanella

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 21 di cui Ricercatori: 15

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
David Ajo'	I	Laura Crociani	III	Gilberto Lucio Rossetto	II
Giovanni Battiston	II	Franco De Zuane	VII	Gino Sbrignadello	II
Franco Benetollo	III	Pierina Destro	IV	Martina Spolaore	III
Giuseppina Bonato	VIII	Rosalba Gerbasi	III	Pierino Zanella	I
Giovanni Carta	III	Carla Giustiniani	VII	Livio Zanotto	III
Annalisa Convertino	III	Luigi Rizzo	IV		

Temi

Tematiche di ricerca:

Preparazione di reagenti per la sintesi dei precursori. Misure chimico-fisiche per la loro caratterizzazione. Deposizione di film e sintesi di ossidi e relativa caratterizzazione.

Stato dell'arte

C'è una grande attività scientifica attorno alla tematica della commessa. L'interesse è incentrato sulla preparazione di precursori che consentano la deposizione a basse temperature e su processi in cui sia facile il controllo delle proprietà dei film ottenuti, oltre che sull'effetto dei substrati.

Azioni

Attività in corso

L'attività è in corso già da anni nel nostro Istituto. Essa consiste nella sintesi e caratterizzazione dei precursori, nella deposizione e caratterizzazione dei film ottenuti e nella metodologia di preparazione degli ossidi in bulk.

Azioni da svolgere e punti critici

E' ragionevole che una parte dei fondi necessari siano forniti da progetti speciali (FISR) e collaborazioni con altri Enti e Aziende (INFN e Nuova OMPI di Piombino Dese), ma essi dovranno essere integrati dal CNR. In caso contrario si dovrà tagliare il progetto in proporzione ai fondi mancanti. Si fa presente al riguardo che la quota pertinente a questa commessa derivante dai residui ha subito e subirà variazioni in seguito alle obbligazioni assunte e da assumere fino al 31/12/04.

Collaborazioni e committenti

Università di Padova (Proff. Tondello e Casarin) Università di Venezia (Prof. Paolucci) IMIP - CNR (Dott. Bruno) Università di Modena (Proff. Pellacani e Manfredini) INFN - Legnaro (Prof. Palmieri) Altre Università anche straniere, Istituti CNR e CNRS. Varie aziende (meccaniche, vetro, gemme, impianti dentari).



Finalità

Obiettivi

Gli obiettivi sono: a) messa a punto di precursori volatili, facilmente manipolabili, a basso costo. b) rivestimenti e film funzionali con proprietà chimico-fisiche, meccaniche (tribologia, tarnishing e packaging) e di bio-compatibilità ottimali. c) sintesi di ossidi in bulk da usare come substrati. **COMPETENZE NECESSARIE:** Sintesi e manipolazione di composti metallorganici ed inorganici e loro caratterizzazione. Gestione di processi MOCVD e caratterizzazione di film e bulk.

Risultati attesi nell'anno

Rivestimenti efficienti nella protezione delle superfici (tribologia- packaging). Materiali funzionali semiconduttori semimagnetici, superconduttori. Materiali per fuel cells efficienti nel trasformare l'energia chimica in energia elettrica. Film di TiO₂ biocompatibile ed efficiente come fotocatalizzatore. Le ricerche avranno uno sviluppo triennale.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.226	98	172	1.398

importi in migliaia di euro



Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce - Dalla tecnica CVD alla tecnica ALD: Messa a punto e ottimizzazione del processo Atomic Layer Deposition per la sintesi di films nanostrutturati con funzionalità meccaniche ed elettriche

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore:	Istituto di chimica inorganica e delle superfici (ICIS)
Sede svolgimento attività:	Padova (PD)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Gilberto Lucio Rossetto

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 0 di cui Ricercatori: 0

Elenco dei partecipanti

	liv.
Giovanni Carta	III
Marco Stefano Natali	III
Gilberto Lucio Rossetto	II

Temi

Tematiche di ricerca:

L'attività riguarderà inizialmente un'indagine per la scelta più opportuna dei precursori e loro utilizzo nel processo convenzionale MOCVD. Contemporaneamente ci si interesserà allo studio della configurazione del reattore ALD da acquisire. Successivamente si ottimizzerà il processo ALD per l'ottenimento di strati nanostrutturati e di superreticoli a base di ossidi e nitrucci con nuove o migliori proprietà tribologiche.

Stato dell'arte

In Italia si sta assistendo ad una proliferazione di iniziative tendenti a sviluppare e sfruttare le potenzialità offerte dalle nanotecnologie. Queste sono prevalentemente rivolte a destinazioni applicative nella microelettronica, nell'optoelettronica, nella biologia e nella caratterizzazione dei materiali ottenuti. Mentre sono minori le competenze nella preparazione e validazione di films sottili di materiali nanostrutturati destinati ad applicazioni meccaniche, chimiche ed energetiche.

Azioni

Attività in corso

Ottimizzazione del processo MOCVD di strati di ossidi metallici (allumina, cromia e afnia) come rivestimenti protettivi dei metalli contro la corrosione e l'erosione e determinazione delle proprietà nanomeccaniche dei rivestimenti ottenuti. Deposizioni MOCVD di zirconia ad alta densità e porosità da utilizzare come elettroliti e come elettrodi nello sviluppo SOFCs. Deposizione MOVPE di SQW e MQW di InP/InGaAs ad alto contenuto di indio per dispositivi balistici.

Azioni da svolgere e punti critici

L'attività di ricerca descritta richiede considerevoli risorse finanziarie per essere condotta secondo modalità tali da produrre risultati significativi. Si dovrà disporre di un reattore equipaggiato oltre che con linee di distribuzione per precursori volatili anche con nuovi sistemi di iniezione per precursori poco volatili. In tal caso si potrà disporre di un'apparecchiatura versatile adatta alla deposizione di diversi tipi di materiali.



Collaborazioni e committenti

Le attività programmate richiedono specifiche collaborazioni sulla caratterizzazione chimica delle superfici e su prove di corrosione dei depositi che sono già in corso tra i proponenti e altri Istituti del CNR, dell'INFN e delle Università di Padova e di Venezia.

Finalità

Obiettivi

Sviluppo di competenze nell'interpretazione delle relazioni tra natura e nanostruttura dei films sottili e delle interfacce in rapporto alle loro funzionalità chimiche, elettriche e meccaniche. Ottimizzazione di processi di deposizione per l'ottenimento di film a nanostruttura controllata. Si utilizzeranno competenze acquisite dai proponenti nella conduzione di processi MOCVD e MOVPE e nella caratterizzazione chimica e strutturale di films sottili.

Risultati attesi nell'anno

Individuazione dei precursori adatti alla deposizione di strati protettivi a base ossidi e nitruri e verifica del loro utilizzo nel processo convenzionale MOCVD. Acquisizione e installazione di un reattore ALD. Ottimizzazione processo ALD per superreticoli a base di ossidi e nitruri e validazione dei depositi mediante verifica delle loro proprietà nanomeccaniche. L'attività si svilupperà in tra anni secondo l'ordine sopraesposto.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
397	0	4	401

importi in migliaia di euro



Progettazione e sintesi di nuovi monomeri per la realizzazione di film e superfici funzionali

Descrizione generale

Progetto: Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca: Progetti di sviluppo competenze
Istituto esecutore: Istituto di metodologie chimiche (IMC)
Sede svolgimento attività: Monterotondo Scalo (RM)
Dip. di prevista afferenza: Progettazione Molecolare
Responsabile indicato: Giovanna Mancini
Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 7 di cui Ricercatori: 3

Elenco dei partecipanti

Roberto Bassanelli	liv. IV	Giuliana Gigli	liv. V	Marco Pastore	liv. VIII
Mauro Bassetti	II	Giovanna Mancini	II	Aurelia Stella	IV
Roberta Cacciapaglia	III	Domenico Mauro Moscardelli	IV		

Temi

Tematiche di ricerca:

Sintesi e completa caratterizzazione, con tecniche quali NMR multifunzionale, spettroscopie di assorbimento e fluorescenza, microscopia elettronica, di sistemi quali: a) liposomi funzionali b) sistemi con proprietà fotoattive che possano essere ancorati o semplicemente depositati su supporti solidi

Stato dell'arte

Lo studio delle interazioni deboli responsabili della organizzazione di superfici con funzioni specifiche ha implicazioni in molti campi, per esempio nella messa a punto di recettori o nella formulazione di sistemi di trasporto di farmaci e/o DNA. Pertanto è al centro dell'interesse di numerosi gruppi di ricerca dei paesi tecnologicamente avanzati.

Azioni

Attività in corso

Sintesi di molecole anfifile per la formulazione di liposomi cationici come sistemi di trasporto di farmaci e/o DNA esogeno. Sintesi di sistemi molecolari e supramolecolari con potenziali proprietà fotoniche e optoelettroniche.

Azioni da svolgere e punti critici

La fattibilità del progetto dipenderà fortemente dalle fonti di finanziamento. Si ritiene inoltre critica la soddisfazione della richiesta di personale a tempo indeterminato nonché la conferma del personale che opera attualmente con contratti di ricerca.

Collaborazioni e committenti

Collaborazioni nell'ambito di progetti nazionali (FIRB e COFIN) e internazionali. Principali collaborazioni: Dr. F. Ricchelli, CNR ITB - Sezione di Padova Dr. Maria Grazia Sacco, CNR ITB Prof. G. Savelli, Università di Perugia Dr. A. Gamini, Università di Trieste Dr. A. Molinari, Dipartimento di Tecnologia e Salute, Istituto Superiore di Sanità. Dr. Antonio De Blasi, Istituto Neurologico Mediterraneo Prof. Paavo Kinnunen, Università di Helsinki

Finalità

Obiettivi

Utilizzazione delle ben documentate competenze di chimica organica fisica per una razionalizzazione delle caratteristiche chimiche e chimico-fisiche che determinano: a) una



veicolazione specifica ed efficiente del farmaco e/o DNA complessato attraverso le barriere biologiche b) le proprietà ottiche e fotoelettroniche adatte alla progettazione e fabbricazione di superfici strutturate e funzionali.

Risultati attesi nell'anno

Attività 2005-2006: disponibilità di un certo numero di nuove molecole anfifile da usare in formulazioni liposomiali e disponibilità di monomeri con proprietà fotoniche e optoelettroniche. Caratterizzazione chimico-fisica dei monomeri e dei loro aggregati. Attività 2007: caratterizzazione chimico fisica dei complessi liposoma/farmaco (o DNA); ancoraggio o deposizione delle molecole con proprietà fotoniche e optoelettroniche su supporto; caratterizzazione chimico-fisica dei sistemi ottenuti.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
544	32	34	578

importi in migliaia di euro



Progettazione molecolare di nanosistemi organizzati

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)
Sede svolgimento attività:	Padova (PD)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Lidia Armelao

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 18 di cui Ricercatori: 10

Elenco dei partecipanti

	liv.	Teresa Mollo	VIII	Pietro Traldi	I
Lidia Armelao	II	Antonio Ravazzolo	VI	Alfonso Venzo	II
Davide Barreca	III	Alessandro Sassi	III	Andrea Vittadini	II
Silvia Gross	III	Roberta Seraglia	III		

Temì

Tematiche di ricerca:

Sintesi di poliossometallati di metalli di transizione e di network ibridi inorganico-organici come dielettrici ad alte frequenze, sensori e switches molecolari; sintesi di network inorganici vetrosi a base di ossidi, anche a porosità controllata e ordinata (mesoporosi) e modifica delle loro proprietà mediante crescita in-situ di nanocluster; sintesi di nanotubi e nanorod inorganici con caratteristiche anisotrope; correlazioni struttura- proprietà.

Stato dell' arte

L' interesse crescente che negli ultimi anni ha investito il settore delle nanotecnologie può essere giustificato, in buona parte, dalla possibilità di progettare a-priori le proprietà dei nanosistemi in funzione delle applicazioni a cui sono destinati. Oggi, infatti, avanzate metodologie sintetiche bottom-up consentono, attraverso aggregazione controllata di opportuni costituenti molecolari, la realizzazione di nanosistemi con prevedibili e specifiche funzioni e proprietà.

Azioni

Attività in corso

Progettazione e sintesi di molecole-precursore da usare in processi CVD e Sol-Gel per la sintesi di nanoparticelle, nanocompositi host/guest, film nanostrutturati; ottimizzazione di processi di deposizione di cluster mono- e bi-metallici su/in matrici di ossidi con attenzione alla dispersione delle particelle; messa a punto di protocolli di sintesi di film nanostrutturati di ossidi semplici e perovskitici e di solfuri per applicazioni in sensoristica, fotonica ed energetica.

Azioni da svolgere e punti critici

La realizzazione di nanosistemi funzionali mediante approcci sintetici bottom-up, la caratterizzazione chimico-fisica e lo studio delle correlazioni struttura-proprietà richiedono consistenti risorse umane e finanziarie. Ciò si rende necessario per sviluppare e mantenere le necessarie sofisticate strumentazioni, per raggiungere una massa critica adeguata e per promuovere la formazione scientifica anche attraverso scambi con realtà di ricerca straniere.

Collaborazioni e committenti

L' attività scientifica si basa su solide collaborazioni tra ricercatori afferenti a Istituti CNR e Università italiane (attraverso INSTM) e straniere, che da tempo sono impegnate in attività di ricerca fondamentale e di innovazione tecnologica nel campo delle nanotecnologie. Le sinergie sono maturate e si sono consolidate anche attraverso un collaudato rodaggio nella partecipazione a progetti di rilevante interesse sia nazionale (PF-MSTA, FIRS, FIRB, PNR...) che internazionale.



Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale consiste nella progettazione e sintesi di nanosistemi multi-functional con approcci bottom-up da fase liquida e chimica da fase vapore, utilizzati singolarmente o combinati in strategie sintetiche di tipo ibrido. L'interesse risiede nello sviluppo di dispositivi optoelettronici innovativi, sensori più selettivi, sistemi per produrre energia senza un corrispondente su scala macroscopica. Competenze di sintesi inorganica, organometallica e di caratterizzazione avanzata.

Risultati attesi nell'anno

L'attività di ricerca avrà come risultato principale una più ampia conoscenza scientifica di base che si concretizzerà attraverso pubblicazioni e brevetti; ulteriori ricadute riguarderanno la messa a punto di strumentazione avanzata per la sintesi e caratterizzazione di molecole-precursore e nanosistemi, la formazione di giovani ricercatori, la realizzazione di prototipi di dimostratori funzionali per sensoristica, fotonica ed energetica.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
946	493	0	946

importi in migliaia di euro



Sintesi e crescita di film e superfici nanostrutturate

Descrizione generale

Progetto:	Progettazione e modifica su base molecolare di film e di interfacce
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio dei materiali nanostrutturati (ISMN)
Sede svolgimento attività:	Roma (RM)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Giuseppina Padeletti

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 46 di cui Ricercatori: 25

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Enrico Agostini	VIII	Daniela Ferro	II	Paolo Plescia	II
Franca Baldana	VII	Mario Figuretti	IX	Maria Luisa Pompili	III
Fiorenzo Bellanti	IV	Francesca Gervasi	VI	Maria Teresa Pugliese	VI
Ilaria Bencini	II	Rosanna Godi	III	Lucia Giacinta Quagliano	III
Maria Luisa Bondi	III	Carolina Granatiero	VIII	Laura Ragazzi	III
Fabio Cardone	IV	Gabriel Maria Ingo	II	Giancarlo Ranieri	IV
Maria Pia Casaletto	III	Saulius Kaciulis	II	Giampaolo Raponi	VII
Antonella Cecchetti	VI	Gabriella Leo	III	Antonio Ricci	V
Luciana Cerri	IV	Marcello Leoni	III	Cristina Riccucci	V
Daniela Chiorrini	VIII	Mauro Lora	V	Salvatore Romeo	VI
Gianni Chiozzini	IV	Antonio Mannocchi	V	Giovanni Ruggieri	VI
Rosaria Ciriminna	III	Rita Mannocchi	VII	Arnaldo Sardoni	IV
Antonella Curulli	III	Daniele Mattei	VII	Renzo Simonetti	V
Laura D'orazi	VI	Antonino Mazzaglia	III	Sesto Viticoli	I
Carlo De Luca	III	Giuseppina Orlandi	IV	Daniela Zane	III
Carla Di Giallorenzo	IV	Giuseppina Padeletti	II		
Fulvio Federici	VI	Mario Pagliaro	III		

Temi

Tematiche di ricerca:

Verranno studiati e realizzati: -film nanostrutturati con caratteristiche superficiali adatte per applicazioni tecnologiche (fotonica, elettronica, hard-coating, sensoristica) -biofunzionalizzazione di superfici e nanoparticelle -individuazione degli agenti responsabili del degrado di manufatti antichi (metallici e ceramici),derivante da processi di superficie, e proposizione di soluzioni conservative -micro-particelle per applicazioni industriali attraverso processi mecano-chimici

Stato dell'arte

Lo sviluppo di sistemi complessi a ricaduta tecnologica dipende dalla capacità di costruire e controllare film, superfici ed interfacce su scala nanometrica. A livello internazionale l'orientamento è quello di creare nuove funzionalità e performances partendo dalla funzionalità molecolare controllando la materia e le sue proprietà, con la prospettiva di fabbricare sistemi innovativi dotati di proprietà modulabili e adattabili, ad alta capacità di riconoscimento molecolare

Azioni

Attività in corso

Sistemi nanostrutturati per applicazioni in fotonica, elettronica, hard coating e biosensoristica. Nanoparticelle per usi legati alle loro proprietà ottiche, magnetiche, meccaniche e per il loro



impiego nel drug delivery Studio del degrado di manufatti storico-artistici metallici e ceramici e proposizione di soluzioni conservative con ricaduta nel settore artigianale Processi meccano-chimici per produzione di particelle submicrometriche come risultato della trasformazione dei rifiuti

Azioni da svolgere e punti critici

Attualmente la ricerca è basata è derivante quasi esclusivamente su fondi derivanti da contratti esterni ed su personale a contratto. Sarebbe però necessario poter rinnovare alcune grandi strumentazioni fondamentali per l'attività di ricerca, ma ormai obsolete, mediante un' opportuna politica di investimenti da parte dell' Ente. Sarebbe inoltre di estrema importanza poter prevedere l' acquisizione di personale a tempo indeterminato.

Collaborazioni e committenti

Max-Planck Inst; Univ. Paris-V; CNRS; CSIC; Centre des Recherches des Musees de France; Museo del Louvre; Museo del Cairo; CSM; Rete Ferroviaria Italiana; Ministero dell'Interno; Cons. Catania Ricerche; ST Microelectronics; Pfizer Italia; Biotech. Center Cranfield Univ. U.K; Univ. Limerick; Istituto Tumori Fondazione Pascale¹-Na; NMSU, New Mexico State Univ.-USA; Dip. Chim. Inorg. Chim-Fis. Univ. Messina; varie Università italiane; varie Pubbliche Amministrazioni, IBIM-CNR

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo generale, basato sulle competenze presenti nella Commessa, è quello di funzionalizzare superfici di interesse tecnologico attraverso lo sviluppo di metodologie di deposizione, manipolazione e trattamenti superficiali che facciano riferimento ad un approccio di tipo molecolare, con particolare riferimento alle nanostrutture come elemento fondamentale per lo sviluppo di sistemi innovativi.

Risultati attesi nell' anno

realizzazione di strutture MIM operanti nelle microonde e a QDs per fotonica a 1,3 micron - realizzazione di dispersioni di nanoparticelle metalliche, ossidiche e lipidiche per applicazioni in campo biomedico e decorativo. -realizzazioni di dispositivi basati su nanostrutture per applicazioni di tipo biomedico -realizzazione di polveri sub-micrometriche attraverso processi meccano- chimici -individuazione di agenti responsabili dei meccanismi di degrado di manufatti antichi

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell' istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Luogo di svolgimento attività: Bologna (BO)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
4.557	1.229	488	5.046

importi in migliaia di euro





Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery

Descrizione obiettivi generali

Sviluppare nuovi farmaci o composti bioattivi, sia in fase di progettazione che in fase di validazione, tramite l'utilizzo di nuovi metodi analitici.

numero commesse	numero moduli	personale equivalente tempo pieno	
		ricercatori	totale
7	6	59	92

Istituti esecutori

Chimica Biomolecolare
Chimica del Riconoscimento Molecolare
Cristallografia
Scienze e Tecnologie Molecolari
Sintesi Organica e la Fotoreattività
Studio delle Macromolecole

Sintesi dei risultati attesi

(da revisionare a cura dei comitati ordinatori)

Comprensione dei comportamenti cellulari tramite lo sviluppo di nuovi farmaci o di composti bioattivi con sfruttamento di nuove metodologie analitiche. Catalogazione di geni e proteine e loro funzione. Realizzazione di nuovi principi attivi anche tramite la creazione di dispositivi di indagine su microarray per genomica. Identificazione di target tumorali e di geni candidato; modelli biomimetici. Identificazione di biomarkers e loro biodisponibilità.

Risorse complessive del triennio

Le risorse da impegnare per questo progetto nel triennio sono:

anno	risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
	A	B	C	D = A + C
2005	8,30	1,25	0,91	9,21
2006	8,11	1,35	0,91	9,02
2007	7,89	1,44	0,91	8,80

valori in milioni di euro



Bioinformatica e modellistica molecolare

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche (ITB)
Sede svolgimento attività:	Segrate (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Medicina
Responsabile indicato:	Luciano Milanese

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca:

L'analisi chimica e strutturale del DNA ha assunto negli ultimi anni un ruolo fondamentale nella ricerca biomedical, di conoscenza delle malattie genetiche e per l'identificazione di nuovi farmaci. Nell'ambito di questo progetto saranno sviluppati programmi e banche dati di bioinformatica nell'ambito di un Laboratorio Interdisciplinare di Tecnologie Bioinformatiche (LITBIO) per la ricerca Genomica e Proteomica e per lo studio delle reti geniche nell'ambito della System Biology.

Stato dell'arte

Verrà progettato un supercomputer appositamente studiato per applicazioni Bioinformatiche, e successivamente interconnesso con altre importanti risorse bioinformatiche. Verrà realizzato una infrastruttura basata sulla tecnologia GRID al fine di utilizzare le risorse di calcolo distribuito in Italia ed in Europa. Verranno realizzati programmi e banche dati per la System Biology. Verrà realizzato un data center per la gestione dei dati provenienti dal sequenziamento di nuovi genomi.

Azioni

Attività in corso

Il numero dei super-calcolatori dedicati alla bioinformatica ed alla modellistica molecolare per l'analisi del genoma umano e per lo studio di nuove molecole è in continuo aumento in tutto il mondo. Questo sforzo deriva dall'aumento della quantità di dati e dei tempi di analisi necessari per lo studio di nuovi genomi e di nuove molecole utili per la realizzazione di nuovi farmaci, per lo studio di reti geniche e metaboliche, per l'analisi di espressione genica, per la proteomica.

Azioni da svolgere e punti critici

"Realizzazione di: - un sistema di calcolo ad alte prestazioni per l'analisi bioinformatica genomica; un sistema per il trattamento dei dati provenienti da sequenziatori di nuova generazione e Data mining per lo studio degli "SNP" - uno studio della variazione strutturale nelle proteine causate da mutazioni puntiforme. - uno studio strutturale di proteine mutate mediante la dinamica molecolare. - una banca dati per lo studio di domini funzionali in proteine coinvolte nel ciclo cellulare"

Collaborazioni e committenti

"I partecipanti sono impegnati nei seguenti progetti: Progetto FIRB: Creazione di un Laboratorio Interdisciplinare di Tecnologie Bioinformatiche (LITBIO) per la ricerca Genomica e Proteomica. Progetto FIRB "Tecnologie abilitanti per la Società della conoscenza ICT". Piattaforme abilitanti per griglie computazionali a elevate prestazioni orientate a organizzazioni virtuali scalabili. Progetto Europeo "Building a comprehensive model of mammalian cell-cycle regulatory network"."



Finalità

Obiettivi

Le collaborazioni saranno particolarmente attive per la realizzazione di un laboratorio pubblico privato dedicato alla Bioinformatica (LITBIO) committente FIRB-MIUR, in collaborazione con il CILEA, IST-Genova, Università di Camerino e Genova, CEINGE. Progetto Europeo, INTAS. Piattaforma di Bioinformatica e Modellistica molecolare con il CISI, per la gestione dei dati di genomica e proteomica. Progetti FIRB di Bioinformatica e per la realizzazione di applicazioni di GRID Computing in Biologia.

Risultati attesi nell'anno

Verrà realizzato un sistema di calcolo ad alte prestazioni per l'analisi bioinformatica, tale sistema sarà reso accessibile ai ricercatori a livello internazionale. Verrà organizzato un sistema per il trattamento dei dati provenienti da sequenziatori di nuova generazione per lo studio degli "SNP", per i microarray. Verrà utilizzata la GRID per l'assemblaggio delle sequenze genomiche e per lo studio strutturale di proteine coinvolte in malattie genetiche mediante la dinamica molecolare.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
209	116	0	209

importi in migliaia di euro



Genomica

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di tecnologie biomediche (ITB)
Sede svolgimento attività:	Segrate (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Medicina
Responsabile indicato:	Gianluca De Bellis

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): di cui Ricercatori:

Temi

Tematiche di ricerca

La presente macroarea di ricerca si occupa di sviluppare tecnologie innovative e di applicarle allo studio di problematiche biomediche nell'ambito della salute. In particolare, si applicano le più recenti metodologie genomiche, bioinformatica al fine di rendere possibile lo studio di sistemi biologici complessi mediante approccio integrato tra diverse metodologie.

Stato dell'arte

Punti critici Le infrastrutture analitiche sono di primissimo livello ma dimensionate per piccoli gruppi di ricerca e progetti di portata relativamente ridotta. Il riconoscimento di questo laboratorio come "large scale facility" di genomica con gli opportuni investimenti in termini di dotazione ordinaria e di personale strutturato, permetterebbe di sostenere il salto di qualità verso la realizzazione di un centro di genomica di livello nazionale e internazionale.

Azioni

Attività in corso

Lo sviluppo di nuovi farmaci o composti bioattivi richiede sia in fase di progettazione che in fase di validazione l'utilizzo di strumenti concettuali e analitici precedentemente indisponibili. L'indagine genomica, proteomica e metabolomica costituiscono il fondamento per l'individuazione di nuovi bersagli molecolari.

Azioni da svolgere e punti critici

Sviluppo di tecnologie di indagine genomica basate su microarray -tecniche di identificazione di target ad alta sensibilità -tecniche di marcatura anche con materiali nanotecnologici -tecniche di analisi del segnale -tecniche di disegno sperimentale DOI Applicazione delle tecnologie microarray in contesti con ricadute - Identificazione di target in ambito tumorale (tumore al rene e mammella) - Identificazione di geni candidato (es schizofrenia)

Collaborazioni e committenti

Progetti in corso FIRB Nanotecnologie Biochip FIRB Nanotecnologie Micran CEE Oliv-Track

Finalità

Obiettivi

IRCSS Università (sia nazionali che internazionali) Altri enti di ricerca (sia nazionali che internazionali) Imprese

Risultati attesi nell'anno

Sviluppo di tecnologie di indagine genomica basate su microarray -tecniche di identificazione di target ad alta sensibilità



Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell' istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
264	199	0	264

importi in migliaia di euro



Chemical genetics e genomica dell'interazione proteine-ligandi

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Leonardo Pierpaolo Manzoni
Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno):	di cui Ricercatori:

Elenco dei participant

Temi

Tematiche di ricerca

L'identificazione del meccanismo d'azione di un composto chimico è un processo oggi assistito dall'interazione tra la genomica e la chimica combinatoriale. La nuova frontiera della drug discovery è disporre di molecole (potenziali farmaci) corredate da dati biochimici che consentano l'identificazione di target e di meccanismi d'azione di composti chimici. La chemical genetics ha lo scopo di individuare piccole molecole in grado di inattivare specificamente l'espressione di particolari geni.

Stato dell'arte

Sintesi di librerie per l'individuazione di inibitori della ADP-ribosil transferasi e sviluppo di saggi enzimatici adatti ad essere automatizzati. Genetica chimica di una pianta modello e sua applicazione al drug discovery per l'individuazione di nuovi inibitori delle integrine. L'attribuzione di nuovo personale ricercatore con competenze interdisciplinari incentrate sulla chimica organica e bioorganica permetterebbe un'accelerazione nell'ottenimento dei risultati.

Azioni

Attività in corso

Vi sono settori dove la competenza chimica si deve associare a competenze biochimiche, biologiche e di genetica molecolare. Nell'ambito della Chemical Biology, Chemical Genetics, Ingegneria Metabolica e Biosintesi Combinatoriale, la posizione Italiana è fortemente carente o quasi nulla. Nell'ambito strettamente chimico occorre sviluppare settori avanzati della Sintesi Innovativa Target e Diversity Oriented utili nella chemical biology e genomics, proteomica, biologia e medicinal chemistry.

Azioni da svolgere e punti critici

Sintesi di librerie di piccole molecole con tecniche combinatoriali o convenzionali rivolte a target biologici, HTP screening, ChemBank. Sintesi di nuovi inibitori della ADP-ribosil transferasi. Individuazione di nuovi strumenti di indagine strutturale e funzionale di specifiche mADP-RT.

Collaborazioni e committenti

Sintesi di librerie di molecole funzionali: nuovi ligandi delle integrine; inibitori della ADP-ribosil transferasi. Sintesi stereoselettive di ligandi non peptidici delle integrine e loro utilizzo come agenti terapeutici e ad uso diagnostico.¹

Finalità

Obiettivi

Altri Istituti CNR. Centri di Ricerca Pubblici e Privati a livello internazionale: Università di Milano, CISI (Centro Interdisciplinare di Studi biomolecolari e applicazioni Industriali), Istituto di



Ricerche Mario Negri Sud, Bracco, Sigma-Tau, Chiron Vaxins, Parco Tecnologico Padano di Lodi.
Il committente è il Dipartimento di Progettazione Molecolare.

Risultati attesi nell'anno

Individuazione di nuovi leads farmaceutici: inibitori dell'ADP-ribosil transferasi: inibitori delle integrine e individuazione di nuovi farmaci antitumorali e di nuovi diagnostici per la medicina nucleare. Individuazione di nuovi metodi di HTS e di strumenti di indagine strutturale e funzionale di specifiche mADP-RT. Composti di interesse terapeutico da avviare ad indagini in modelli animali di patologie.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)
per processi produttivi

- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare (ICB)
Luogo di svolgimento attività: Pozzuoli (NA)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.088	0	0	1.088

importi in migliaia di euro



Cristallografia di biomolecole e studi funzionali

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di cristallografia (IC)
Sede svolgimento attività:	Bari (BA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Doriano Lamba

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 25 di cui Ricercatori: 16

Elenco dei partecipanti

Alvaro Amorese	IV	Fausto D'aprile	liv. IV	Franca Nespola	liv. VIII
Gianmichele Arrighetti	V	Raimondo Di Gennaro	VIII	Barbara Pascucci	III
Fiorella Bachechi	II	Vincenzo Fares	II	Augusto Pifferi	III
Luisa Barba	III	Maria Rita Ferrante	V	Giorgio Pochetti	III
Cecilia Bartolucci	III	Enrico Gavuzzo	II	Cataldo Quinto	VII
Ersilia Bombelli	IV	Maria Teresa Giardi	II	Antonello Ranieri	VIII
Mercedes Camalli	III	Claudio Gramaccioni	VI	Giuseppina Rea	III
Francesco Capitelli	III	Doriano Lamba	III	Riccardo Spagna	I
Alberto Cassetta	III	Andrea Margonelli	III	Giovanni Ughetto	II
Massimiliano Catricala'	VI	Sandro Mirandi	V		
Luciano Cellai	I	Pasquale Mura	II		

Temi

Tematiche di ricerca

Studi sintetici e strutturali di vari complessi di rutenio e di oro. Isolamento/espressione e studio strutturale di: complessi con oligonucleotidi del dominio-sito attivo della Topoisomerasi I e di proteine PPAR e sintesi di loro ligandi; complessi AChE-inibitori; varie forme della chaperonina GroEL; proteine allergeniche dal polline di *Cupressus arizonica*; amminoossidasi isolate ed in complesso con inibitori; isolamento del Fotosistema II da organismi fotosintetici.

Stato dell'arte

La ricerca farmaceutica soffre di un calo di innovazione, con una diminuzione nella produzione per anno di nuovi farmaci, che manifesta la necessità di maggiori investimenti in risorse umane e finanziarie. In tal senso possono operare specificamente i recenti sviluppi della Biologia Strutturale, basati sulla capacità di produzione, purificazione e cristallizzazione di macromolecole biologiche e di sviluppo delle metodologie che facilitino la determinazione delle loro strutture.

Azioni

Attività in corso

L'IC svolge da anni ricerche in campo farmaceutico, indirizzate in particolare verso lo studio delle relazioni struttura-attività per la progettazione di nuovi farmaci ed attualmente integrate dallo studio delle basi molecolari di processi biologici quali: il riconoscimento proteina- proteina o proteina-acido nucleico; i meccanismi catalitici degli enzimi, in condizioni fisio/patologiche; l'espressione genica; il folding proteico; la produzione di proteine per uso diagnostico e per vaccini.

Azioni da svolgere e punti critici

Punti critici comuni a molte delle ricerche di Biologia Strutturale consistono nelle difficoltà incontrate nella espressione di proteine in forma solubile ed opportunamente foldate, nonché nell'ottenimento di cristalli singoli adatti alla diffrazione di raggi X.



Collaborazioni e committenti

Politecnico ed Università di Milano, Roma 1, 2 e 3, Firenze, Siena, L'Aquila, Chieti, Pisa, Salerno, Camerino, Bari; Istituti CNR IMC, ICB, ISMN, ISM; Istituto Superiore di Sanità di Roma, NIH, USA, McGill University di Montreal, Max-Planck-Institut fuer Biochemie di Monaco, EMBL di Heidelberg, Fondazione Callerio di Trieste; Industrie ACRAF-Angelini e Polifarma di Roma, Menarini Ricerche di Pomezia, Chiesi Farmaceutici di Parma, Sanochemia Pharmazeutika, Vienna, TEVA, Netanya (Israele).

Finalità

Obiettivi

Progettazione di metodologie avanzate e nuovi prodotti di interesse bio- farmacologico ed industriale, afferenti in particolare al campo farmaceutico, ottimizzandone le proprietà, tramite procedimenti di sintesi organica e metallo-organica, sintesi automatica in fase solida, work-up a prodotti finiti, analisi spettroscopica, studio di relazioni struttura- attività e struttura-funzione, modellistica molecolare, studi strutturali allo stato solido, isolamento ed espressione di proteine.

Risultati attesi nell'anno

Progettazione di: farmaci e metallofarmaci anti-tumorali; inibitori dell'AchE come farmaci anti-Alzheimer; inibitori anti-Amminoossidasi, come modulatori dei processi di crescita e sviluppo; antivirali (HIV, HCV); vaccini per gli allergeni maggiori del polline di Cupressus arizonica e kit per la diagnostica. Comprensione di processi di folding proteico. Bio- produzione di composti antiossidanti.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare (ICB)

Luogo di svolgimento attività: Roma (RM)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
4.360	281	193	4.553

importi in migliaia di euro



Interazioni legando-recettore: studi modellistici spettroscopici, fotofisici e conformazionali

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Sandra Monti

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 3 di cui Ricercatori: 4

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Pietro Bortolus	II	Anita Manderioli	IV	Giancarlo Marconi	II
Roberto Cortesi	VII	Ilse Manet	III	Maurizio Minghetti	VII
Alessandra Dall'olio	VI	Francesco Manoli	V	Sandra Monti	II

Temi

Tematiche di ricerca

Studio dell' interazione di farmaci chirali con albumine e ciclodestrine. Sviluppo di calcoli conformazionali di docking per l' interpretazione delle proprietà dei sistemi associati. Messa a punto delle tecniche necessarie per l' indagine spettroscopica di sistemi nanostrutturati e test sulle sospensioni di nanoparticelle funzionalizzate. Estensione degli studi al binding di legandi a proteine di membrana e ad altri sistemi quali coppie antigene-anticorpo, enzimi-substrati, DNA-proteine.

Stato dell' arte

I metodi finora proposti per quantificare le interazioni legando- recettore (microcalorimetria, spettroscopie UV, massa, NMR, CD, fluorescenza, tecniche varie di analisi superficiale) hanno caratteristiche specifiche rispetto ai fenomeni osservati e talvolta mostrano bassa sensibilità, inadeguata riproduzione delle condizioni fisiologiche, difficoltà di uso. C' è pertanto una continua ricerca di nuove metodologie capaci di rivelare e possibilmente misurare costanti di binding.

Azioni

Attività in corso

Si stanno studiando effetti di riconoscimento diastereoselettivo da parte di albumine e di ciclodestrine su farmaci dotati di elementi stereogenici (es. chetoprofen, artemisinina). Questi studi, effettuati in soluzione, sono basati sull' uso del CD e sull' analisi globale di dati spettrali ottenuti variando la concentrazione del farmaco. Con questo approccio si ottengono le costanti di binding relative ai siti di maggiore affinità e si caratterizzano spettroscopicamente i relativi complessi.

Azioni da svolgere e punti critici

Le nanoparticelle hanno una capacità di scattering che deriva dalla funzionalizzazione della superficie e dal binding del legando. La misura del CD si basa sulla luce trasmessa e può presentare problemi dovuti alla microeterogeneità dei campioni. La misura della emissione può essere perturbata dallo scattering stesso. Si dovranno trovare condizioni in cui la luce trasmessa sia sufficiente. Si effettueranno misure risolte nel tempo che possono distinguere fra scattering e fluorescenza



Collaborazioni e committenti

ISTM-Milano fornirà le nanoparticelle rivestite di uno strato di molecole opportunamente funzionalizzate ed effettuerà lo studio della diffusione della luce laser, quantificando l'avvenuta adesione di legandi in soluzione e determinando la costante di affinità. I dati ottenuti spettroscopicamente all'ISOF ed all'ICB-Padova permetteranno di valutare le potenzialità del metodo di light scattering per la misura di costanti di binding, prerequisite in vista della ingegnerizzazione della tecnica

Finalità

Obiettivi

Lo scopo è quello di acquisire informazioni sull'interazione di legandi con recettori di interesse biologico, misurare costanti di binding, acquisire informazioni spettroscopiche, fotofisiche e conformazionali che consentano una caratterizzazione strutturale delle specie associate. Le competenze specifiche dei partecipanti sono di tipo spettroscopico (assorbimento ed emissione stazionari e risolti in tempo) e computazionale (metodi quantomeccanici semiempirici, ab initio, meccanica molecolare)

Risultati attesi nell'anno

Saranno evidenziati gli effetti del binding sulle proprietà spettroscopiche del legando ed, usando il legando come sonda, saranno ottenute informazioni sul sito del recettore. Nel caso di legandi dotati di elementi stereogenici, si otterranno dati sul riconoscimento diastereoselettivo da parte di proteine di trasporto e/o di membrana. Si confronteranno i risultati con i dati di binding ottenuti per light scattering.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Luogo di svolgimento attività: Milano (MI)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
1.486	38	93	1.579

importi in migliaia di euro



Lipidomica, genomica e proteomica dello stress radicalico cellulare e biomarker correlati.

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per la sintesi organica e la fotoreattività (ISOF)
Sede svolgimento attività:	Bologna (BO)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Chryssostomos Chatgililoglu

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 14 di cui Ricercatori: 8

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Giovanni Bragaglia	V	Silvano Favaretto	V	Maurizio Tamba	I
Chryssostomos Chatgililoglu		Carla Ferreri	III	Armida Torreggiani	III
Roberta Chiodini	I	Maurizio Ghirardelli	VIII		
Mila D'angelantonio	VIII	Maurizio Guerra	I		
Sergio Dellonte	III	Anita Manderioli	IV		
	II	Maria Luisa Navacchia	III		

Tem

Tematiche di ricerca

Due workplans paralleli saranno realizzati nel progetto: WP1 - Indagine lipidomica su membrane cellulari esposte ad insulti radicalici. Costruzione di una libreria di lipidi modificati per studi di struttura, interazioni biologiche e trasformazioni enzimatiche in correlazione a stati patologici. WP2 - Indagine genomica legata al danneggiamento del DNA. Formazione per via radicalica di unità 5',8-ciclopuriniche e proposti come indicatori del danno ossidativo del DNA.

Stato dell'arte

Il progetto si affianca agli studi che i ricercatori della commessa eseguono nell'ambito di due network finanziati dalla EU attivi nei prossimi anni. Inoltre, le collaborazioni con partners industriali (Euticals group SpA, Varese; Biochimici PSN, Bologna) permetteranno di sviluppare la piattaforma biotecnologica in senso applicativo in diagnostica, farmacologia e nanomedicina.

Azioni

Attività in corso

La tematica della reattività radicalica correlata a sistemi biologici è focalizzata attualmente al danno radicalico apportato a lipidi insaturi e nucleosidi. L'approccio interdisciplinare utilizza lo studio chimico- meccanistico dei processi, la caratterizzazione dei prodotti e gli studi biochimici e farmacologici per valutare l'influenza della modificazione strutturale sull'attività biologica.

Azioni da svolgere e punti critici

L'analisi lipidomica potrebbe avvalersi di una procedura automatizzata e si richiede un partner interessato allo sviluppo di automatismi in tale campo. Inoltre la fattibilità dell'inserimento della banca dati dello stress radicalico in reti neurali artificiali, renderebbe efficace una globale valutazione dei fattori che concorrono al miglioramento della qualità della vita. L'adeguatezza del personale, mantenuta o migliorata rispetto ai numeri attuali renderebbe più fattibile il progetto.

Collaborazioni e committenti

La collaborazione con divisioni mediche avverrà su screening di patologie umane correlate a infiammazione ed invecchiamento. In collaborazione con il partner industriale, alcuni ciclonucleosidi saranno valutati per applicazioni di farmaco-genomica. La collaborazione industriale nel campo delle formulazioni nutraceutiche, prevede la messa a punto di integratori



dietetici ad hoc, per la protezione della struttura dei lipidi e coadiuvanti di terapie antinfiammatorie.

Finalità

Obiettivi

L'obiettivo è l'acquisizione di dati sulle trasformazioni del corredo cellulare e metabolico legate allo stress radicalico, per fornire le basi molecolari a processi degradativi cellulari ancora non chiariti, riferiti a stati patologici ed invecchiamento. Sono utilizzate competenze di tipo chimico, cinetico-meccanicistico su specie radicaliche, nonché biochimico e biotecnologico e sono previste collaborazioni per competenze in campo medico, biologico e nanotecnologico.

Risultati attesi nell'anno

Preparazione di librerie di lipidi e nucleosidi modificati ed impiego come markers (1 - 3 anno); studio del danno accoppiato lipidi/proteine [β -amiloide (Alzheimer), proteina prionica (Cruetzfeldt) e TAT (virus HIV)] (1-3 anno); studi strutturali biochimici e biologici del danno radicalico e sistemi di riparazione (2-3 anno); applicazione di sistemi trasportatori di elettroni alla nanomedicina (1-3 anno). Il risultato generale atteso è la mappatura dello stress radicalico cellulare.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
2.098	193	163	2.261

importi in migliaia di euro



Metodologie cristallografiche

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di cristallografia (IC)
Sede svolgimento attività:	Bari (BA)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Carmelo Giacobazzo

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 21 di cui Ricercatori: 13

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Angela Altomare	III	Caterina Chiarella	VI	Massimo Ladisa	III
Gianmichele Arrighetti	V	Giuseppe Chita	VI	Rocco Lassandro	VI
Luisa Barba	III	Liberato De Caro	III	Andrea Margonelli	III
Rocco Caliandro	III	Maria Grazia Distante	VII	Sandro Mirandi	V
Mercedes Camalli	III	Giovanni Filograsso	VII	Anna Moliterni	III
Benedetta Carrozzini	III	Cinzia Giannini	III	Augusto Pifferi	III
Giovanni Luca Cascarano	II	Maria Teresa Giardi	II	Antonello Ranieri	VIII
Massimiliano Catricala'	VI	Claudio Gramaccioni	VI	Rosanna Rizzi	III
Antonio Cervellino	III	Antonietta Guagliardi	III	Riccardo Spagna	I

Temi

Tematiche di ricerca

Nuove metodologie per soluzione di strutture macromolecolari e loro implementazione in programmi di calcolo (high throughput crystallography). Soluzione di strutture cristalline da dati da polveri e da fibre. Analisi quantitativa di materiali nanocristallini, caratterizzazione tramite ELETTRA di film sottili su semiconduttori, dei prodotti di reazione e di nanotubi di Carbonio, di quasicristalli. Sviluppo di un diffrattometro portatile; ricerca strumentale sulla linea di Cri

Stato dell'arte

A livello internazionale esiste una forte richiesta di nuove metodologie nei settori farmaceutico, proteomico, nanostrutturato. LIC ha lunga tradizione nel settore metodologico e gli viene unanimemente riconosciuto un ruolo preminente in quest'area scientifica. L'IC compete con numerosi gruppi di ricerca negli USA e in Europa (ad es., Univ. di Gottingen, York, Nancy, Mosca, Buffalo,). Esistono legami forti fra IIC e i competitori, e spesso ricercatori sono in visita presso IIC.

Azioni

Attività in corso

- Progettazione di metodi per la soluzione di strutture cristalline da dati di diffrazione da cristallo singolo, da polveri, da fibre (ab initio, SAD-MAD, SIR-MIR; metodi per polveri).
- Progettazione di metodi per la caratterizzazione di materiali nanocristallini, microcristallini, composti nanostrutturati, quasicristalli.
- Progettazione di nuova strumentazione (diffrattometro-X portatile, anche per fluorescenza). Ricerca strumentale sulla linea di ELETTRA dedicata alla Crista

Azioni da svolgere e punti critici

Non si intravedono punti critici di natura scientifica che possano vanificare le attività. Tuttavia alla fine del 2005 è pianificata la apertura di una nuova attività scientifica, dedicata alla diffrazione dei polimeri. Condizione sine qua non è l'acquisto di un diffrattometro per fibre, programmato da



lungo tempo, cui interverremo con i nostri residui. La ricerca coinvolgerà soprattutto i ricercatori che saranno assunti dai prossimi concorsi CNR-MISM.

Collaborazioni e committenti

Questa commessa collabora con a) Dipart. Di Scienze della Terra ,Università di Perugia; b) Università de La Laguna , Tenerife , Spagna; c) Università di Barcellona, Spagna; d)Università di Nancy, Francia;e) Paul Scherrer Institute, Willigen , Svizzera; f) Sincrotrone di Campinas, Brasile.;g) ELETTRA, Trieste, h) Dipt. Di Chimica , Univ. di Bari; i) Univ. Di Marrakech, Marocco; i) Univ. di Padova, Italia;.....

Finalità

Obiettivi

Al settore metodologie cristallografiche fanno capo ricerche biologiche , chimiche , farmacologiche. Ad esse questa commessa offre sostegno tramite progettazione di modelli matematici e programmi di calcolo di grande diffusione internazionale. Obiettivi caratterizzanti sono la soluzione del problema della fase cristallografica e la caratterizzazione di materiali nano e micro cristallini. Le competenze sono già presenti nell' IC.

Risultati attesi nell' anno

Nuova modellizzazione delle tecniche ab initio, SIR-MIR-SAD-MAD-SIRAS- MIRAS, molecular replacement; diffrazione da polveri, da fibre, da nanocristalli e da quasicristalli. Studio di film sottili e di nanotubi di carbonio. Diffrazione da oggetti finiti. Si renderanno disponibili i programmi IL MILIONE, EXPO2004 e SIR2004. Sarà immesso sul mercato il diffrattometro portatile per diffrazione e fluorescenza.

Potenziale impiego:

(campo da compilare a cura dell' istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
4.138	654	217	4.355

importi in migliaia di euro



Strutturistica NMR e modellistica molecolare di proteine legate a processi patologici

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto per lo studio delle macromolecole (ISMAC)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Lucia Zetta

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 5 di cui Ricercatori: 3

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Natalina Bergamini	V	Vittoria Crosignani	IV	Laura Giuditta Ragona	III
Palmira Bonassi	IV	Fulvia Greco	V	Pietro Secondi	IV
Davy Cam	VII	Salvatore Italia	V	Francesca Tarchi	VII
Elena Castoldi	VII	Mario Izzo	VII	Giulio Zannoni	IV
Roberto Consonni	III	Riccardo Passera	IV	Lucia Zetta	II

Temi

Tematiche di ricerca

Espressione di proteine ricombinanti e loro mutanti (mutazioni specifiche per folding e/o per funzione) arricchiti in ^{13}C e ^{15}N per studi NMR; -Risoluzione della struttura mediante esperimenti NMR multidimensionali; -Caratterizzazione di mobilità e flessibilità e comprensione del ruolo che le proprietà dinamiche hanno nella funzione; -Caratterizzazione del binding proteina-ligando -Studio di folding e refolding, con l'individuazione di intermedi eventualmente presenti

Stato dell'arte

Nell'ultimo decennio la genomica e la proteomica hanno prospettato nuove ed interessanti strategie di prevenzione, diagnostica ed intervento verso numerose malattie umane con basi genetiche. In questo obiettivo giocano ruoli importanti la biologia molecolare per la produzione di proteine e mutanti, l'NMR per la caratterizzazione strutturale, dinamica e funzionale di proteine in soluzione, i metodi computazionali per la previsione di struttura.

Azioni

Attività in corso

Biologia molecolare, spettroscopia NMR e modellistica molecolare sono usati per studiare funzione, struttura e dinamica di proteine (calicine, inibitori di proteasi) per comprendere i meccanismi legati a processi patologici. Sono in corso di studio -meccanismo di "folding" di proteine legate a patologie neurodegenerative -basi molecolari responsabili di attività angiogenica o antitumorale

Azioni da svolgere e punti critici

Nel complesso la commessa non presenta criticità di rilievo poiché molte delle attività sono attualmente in corso. Va però segnalata la necessità di strumentazione NMR adeguata al progetto di ricerca proposto, mancando all'interno del CNR spettrometri con campi magnetici al di sopra di 600 MHz.

GIUSTIFICAZIONE FINANZIAMENTO RICHIESTO:

- 1- Trasferimento nel 2005 di ISMAC-Milano in nuova sede e riattivazione dei Laboratori;
- 2- Trasporto e riattivazione di n. 4 Spettrometri NMR (ISMAC-Milano);



Collaborazioni e committenti

Dip. Scientifico e Tecnologico UNI Verona, H. Molinari; Dip. Scienze e Tecnologie Chimiche, UNI Tor Vergata Roma, M. Paci, D. Cicero; Fond. Maugeri Pavia, A. Lanza; Ist. Sperimentale Culture Foraggiere Lodi, Aldo Tava; Dip. Biologia e Biochimica Molecolare UNI Bari, R. Gallerani; Ist. Biomembrane e Bioenergetica, CNR Bari, L. Ceci; Dip. Scienze e Tecnologie Biomediche, UNI Milano, M. Gussoni; Dip. Biotecnologie e Bioscienze, UNI Milano-Bicocca P. Tortora, P. Fusi

Finalità

Obiettivi

Obiettivo: Determinazione della struttura di proteine appartenenti alla famiglia delle calicine e degli inibitori di proteasi, legate a patologie umane quali quelle neurodegenerative ed oncologiche. Competenze: Espressione di proteine e loro mutanti, impiego della spettroscopia NMR e di metodi di calcolo per caratterizzare la struttura di proteine e di loro complessi con biomolecole, i meccanismi di folding e refolding e la dinamica di proteine -l'interazione di proteine con biomolecole

Risultati attesi nell'anno

I risultati attesi in ordine cronologico sono: 1)Comprensione della relazione struttura-funzione di proteine (calicine, inibitori di proteasi) coinvolte in processi neurodegenerativi e tumorali. 2)Sviluppo di nuove strategie di prevenzione, diagnostica ed intervento verso innumerevoli malattie umane con basi genetiche.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di chimica biomolecolare (ICB)

Luogo di svolgimento attività: Pozzuoli (NA)

Istituto esecutore: Istituto di chimica del riconoscimento molecolare (ICRM)

Luogo di svolgimento attività: Milano (MI)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
3.770	149	195	3.965

importi in migliaia di euro



Sviluppo di Microsistemi Analitici

Descrizione generale

Progetto:	Piattaforme e tecnologie abilitanti di interesse chimico e del drug discovery
Tipologia di ricerca:	Progetti a carattere strategico
Istituto esecutore:	Istituto di chimica del riconoscimento molecolare (ICRM)
Sede svolgimento attività:	Milano (MI)
Dip. di prevista afferenza:	Progettazione Molecolare
Responsabile indicato:	Marcella Chiari

Unità di personale a tempo indeterminato (equivalente tempo pieno): 5 di cui Ricercatori: 3

Elenco dei partecipanti

	liv.		liv.		liv.
Maria Angela Bacigalupo	III	Marina Cretich	III	Sergio Riva	II
Giacomo Carrea	I	Giacomo Meroni	IV	Raffaele Somma	VII
Marcella Chiari	II	Gianluca Ottolina	III		

Temi

Tematiche di ricerca

1) Elettroforesi di DNA in microchip: utilizzo di prototipo per microchip elettroforesi realizzato nell'ambito del progetto FIRB; nuovi rivestimenti per microchip e nuove matrici setaccianti; 2) microarray a DNA e proteine: produzione di superfici funzionali e loro caratterizzazione. Realizzazione di microarray con utilizzo in genomica e proteomica; 3) dosaggio di analiti di impatto ambientale mediante dosaggi fluoroimmunologici a risoluzione di tempo.

Stato dell'arte

Lo sviluppo di sistemi analitici miniaturizzati e la loro applicazione in diagnostica ha avuto negli ultimi anni una forte accelerazione. Un esempio è quello della tecnologia microarray. Si prevede una rapida penetrazione di questa tecnica nella diagnostica clinica e nei laboratori ospedalieri. L'interesse verso l'utilizzo di micro e nano tecnologie in campo analitico è confermato dal numero dei progetti di ricerca su questo tema in campo nazionale e comunitario.

Azioni

Attività in corso

L'attività riguarda: 1) la realizzazione di uno strumento prototipo per elettroforesi in microchip con canali capillari da utilizzare nella separazione del DNA nel quale sia operante un sistema di detezione LIF; 2) la sintesi di polimeri da utilizzare come matrici setaccianti il DNA; 3) la derivatizzazione degli analiti e la loro coniugazione a macromolecole e la marcatura di anticorpi antispecie con il chelante fluorescente; la preparazione di liposomi e la sintesi di peptidi citolitici.

Azioni da svolgere e punti critici

I RESIDUI DELLA COMMESSA SONO STATI CALCOLATI DALLA MASSA SPENDIBILE AL 14-12-2004 (EURO 456278) E NON AL 21-11-2004 (EURO 418566). Un punto critico risiede nella difficoltà a trovare personale a contratto in possesso della qualificazione necessaria. E' importante che ai ricercatori, con contratto a termine, che fanno parte del team vengano offerte posizioni adeguate in modo da evitare la fuga verso laboratori esteri. Alcuni di questi, che si sono formati presso i laboratori C.N.R. hanno infatti acquisito competenze che li rendono assai competitivi, anche sul mercato internazionale.

Collaborazioni e committenti

I progetti in corso prevedono la collaborazione con: il Dipartimento di Elettronica e di Informazione del Politecnico di Milano; l'Istituto IMM-C.N.R., sezione di Bologna; l'Istituto Sperimentale Italiano Spallanzani di Milano; il Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione,



Università di Pisa; il Dipartimento di Chimica e Ingegneria dei Materiali 'Giulio Natta' del Politecnico di Milano; l'Ospedale San Raffaele di Milano.

Finalità

Obiettivi

Attraverso l'integrazione di competenze in campo chimico, tecnologico/strumentale e clinico/diagnostico, ci si propone di realizzare:

- 1) sistemi analitici miniaturizzati, basati su sistemi microchip per l'analisi parallela, quantitativa e sensibile di piccole quantità di sostanze biologiche (DNA, proteine, et);
- 2) nuove superfici e materiali funzionali;
- 3) sintesi di apteni derivatizzati, di marcatori di fluorescenza a risoluzione di tempo e ottimizzazione del dosaggio.

Risultati attesi nell'anno

- 1) Nuovi metodi separativi per microchip elettroforesi di acidi nucleici;
- 2) nuove superfici funzionali per tecnologia microarray;
- 3) caratterizzazione dei rivestimenti funzionali;
- 4) nuove sonde per DNA e proteine e protocolli per il loro utilizzo in tecniche di ibridazione su fase solida;
- 5) nuovi immunogeni per l'identificazione di pesticidi, nuovi marcatori utilizzando chelanti per ioni europio e terbio.

Potenziale impiego

(campo da compilare a cura dell'istituto)

- per processi produttivi
- per risposte a bisogni individuali e collettivi

Moduli

Istituto esecutore: Istituto di scienze e tecnologie molecolari (ISTM)

Luogo di svolgimento attività: Milano (MI)

Risorse Commessa 2005

risorse finanziarie totali allocate	di cui risorse da terzi	costi figurativi	valore effettivo
A	B	C	D = A+C
163	128	37	200

importi in migliaia di euro