

# **La Chimica e l'Industria**online

 **Organo Ufficiale della Società Chimica Italiana**



**Chimica e alimenti**

**Premi a giovani ricercatori SCI**

# COSTRUIAMO UN PRESENTE PENSATO PER AVERE FUTURO



Passione, spirito di squadra e uno sguardo sempre rivolto al futuro. Mapei contribuisce alle più importanti opere architettoniche e infrastrutturali, ai progetti in ambito residenziale, al restauro di edifici storici a livello globale. Nel segno dell'innovazione, ci impegniamo ogni giorno per un'edilizia sempre più sostenibile.

**È TUTTO OK,  
CON MAPEI**

Scopri di più su [mapei.it](https://mapei.it)





## SCI: UN LEGAME SEMPRE PIÙ FORTE



Cari Soci,  
mi rivolgo a voi con emozione sincera e con un profondo senso di responsabilità all'inizio del mio mandato come Presidente della Società Chimica Italiana (SCI) per il triennio 2026-2028, attraverso la stesura di questo editoriale sul nostro organo di informazione e cultura *La Chimica e l'Industria*.

La fiducia che mi avete accordato è per me un grande onore, ma soprattutto un impegno che sento di condividere con ciascuno di voi, nella consapevolezza del valore umano e scientifico della nostra comunità.

La SCI non è soltanto una grande istituzione con oltre un secolo di storia, ma anche una comunità viva, fatta di persone, idee, esperienze e passioni, fondata su valori condivisi: il rigore scientifico, l'etica della responsabilità, il rispetto delle persone e delle idee, la convinzione che la conoscenza rappresenti uno strumento essenziale di progresso civile e sociale.

In questi anni la Società ha accompagnato lo sviluppo scientifico e culturale del nostro Paese, sostenendo la ricerca, la formazione ed il dialogo tra scuola, università, professioni ed industria. Questo patrimonio, costruito nel tempo, rappresenta la nostra forza più autentica ed il punto di partenza per affrontare le sfide future. Preservare e rafforzare questi valori significa infatti custodire l'identità

della SCI e, allo stesso tempo, renderla capace di parlare al futuro, con autorevolezza e credibilità.

Viviamo una fase storica particolarmente complessa ed in continua evoluzione, caratterizzata da trasformazioni rapide e spesso profonde che sollevano interrogativi di grande rilevanza scientifica, culturale e sociale. Temi centrali come la tutela dell'ambiente, la salute, l'energia, la sicurezza alimentare, lo sviluppo sostenibile, l'economia circolare, insieme alle sfide poste dall'intelligenza artificiale e dalle nuove tecnologie, richiedono oggi risposte solide e credibili, fondate sulla conoscenza, sul rigore scientifico e su un forte senso di responsabilità verso la collettività e le generazioni future.

La chimica può essere considerata un legame di tutti questi processi, rappresentando il fulcro di una cultura scientifica, oggi come non mai, fortemente fondata sulla multidisciplinarietà e la SCI ha il compito di renderlo visibile, comprensibile e riconosciuto, dialogando con le istituzioni, con il mondo produttivo e con la società, con chiarezza, apertura e spirito di servizio.

Nel corso del mio mandato desidero rafforzare il senso di appartenenza alla Società e valorizzarne tutte le componenti, senza mai tralasciare i valori e gli obiettivi strategici perseguiti fino ad oggi da tutti i Presidenti che egregiamente mi hanno preceduto, con particolare riferimento al Prof. Farinola con il quale ho avuto il piacere di lavorare a stretto contatto, in qualità di Presidente della Divisione di Chimica Analitica, durante l'ultimo triennio. Una SCI forte e unita è una SCI capace di includere e garantire confronto e dialogo tra chi opera nella scuola, nella ricerca pubblica e privata, nel mondo delle libere professioni, nell'industria, e nel mondo accademico. Il dialogo rappresenterà le fondamenta del mio mandato, quale strumento essenziale per dar voce alle esigenze, alle idee ed al talento di tutti coloro che, come me, credono nella Società Chimica Italiana, attraverso l'istituzione di commissioni e delegati fautori di azioni congiunte che possano sviluppare nuove sinergie e trovare

punti di contatto sempre più condivisi tra gli attori della nostra società, sempre con attenzione alla ricerca e allo sviluppo dell'intero nostro Paese.

Questo percorso sarà accompagnato da strategie di comunicazione mirate, attraverso l'utilizzo coordinato di tutti i canali disponibili, con l'obiettivo di raggiungere in modo efficace i diversi interlocutori e di rafforzare il ruolo centrale della SCI nel contesto attuale. Ciò consentirà inoltre di accrescere l'efficacia dell'azione della nostra comunità, valorizzandone la pluralità in una prospettiva inclusiva e attenta alle politiche di parità di genere.

La chiarezza e la trasparenza della comunicazione assumono un'importanza critica nello scenario attuale, caratterizzato da un continuo divenire di cambiamenti sociali e politici e, purtroppo, spesso anche da una disinformazione diffusa.

Un'attenzione particolare sarà dedicata ai giovani, che rappresentano il futuro della chimica italiana e lo strumento che potrà contribuire in maniera decisiva al consolidamento ed alla valorizzazione della SCI, ben oltre i confini nazionali. Grande attenzione verrà quindi data alla valorizzazione dei giovani ed al sostegno del loro talento mediante la promozione di iniziative mirate a rafforzarne la progettualità, promuoverne la formazione ed incentivarne la produttività, accompagnando la loro crescita personale e professionale, offrendo loro spazi condivisi di partecipazione e responsabilità.

In questo percorso, i Giochi della Chimica, di Avogadro e Cannizzaro, così come le Olimpiadi Internazionali della Chimica continuano ad essere uno straordinario strumento di avvicinamento dei più giovani alla nostra disciplina. In tale prospettiva si colloca anche l'organizzazione in Italia delle Olimpiadi Internazionali della Chimica nel 2028, una sfida ambiziosa e stimolante che, rappresenterà un'importante occasione scientifica, educativa e simbolica per il nostro Paese e per l'intera comunità chimica nazionale.

Un altro appuntamento cruciale sarà il prossimo Congresso Nazionale della SCI del 2027, chiama-

to ad essere non solo un momento di confronto scientifico di alto livello, ma anche un'occasione di coesione, dialogo ed apertura verso il mondo produttivo e la società. Sarà una sfida organizzativa e culturale che affronteremo insieme, con entusiasmo e dedizione.

Tutto questo richiede una Società ben organizzata, trasparente e capace di evolvere. Mi impegnerò affinché la SCI diventi una Società sempre più efficiente, vicina ai Soci e capace di interpretare i cambiamenti del nostro tempo, valorizzando competenze, esperienze e idee in un clima di crescita continua. Tale crescita non dovrà essere intesa soltanto in termini di consistenza numerica, ma soprattutto come ampliamento e diversificazione degli ambiti di provenienza dei Soci, con particolare attenzione al coinvolgimento dei professionisti non accademici, al rafforzamento delle iniziative di interesse industriale e alla promozione della formazione e dell'aggiornamento professionale, anche attraverso l'adozione di soluzioni multimediali innovative.

Guardo a questo percorso con fiducia. So di poter contare su una comunità ricca di passione, competenza e spirito di collaborazione. Da parte mia, metterò ascolto, disponibilità e impegno, convinto che solo lavorando insieme si possano affrontare le sfide che ci attendono.

Desidero concludere questo editoriale richiamando il mio motto sin dalla candidatura "*SCI: un legame sempre più forte*". Sono convinto che ciascuno di noi, con le proprie competenze, possa contribuire a rafforzare il legame tra la SCI, la scuola, l'università, le libere professioni e l'industria, mettendo a frutto la conoscenza scientifica per sviluppare tecnologie e prodotti capaci di rispondere ai bisogni della società, migliorando al contempo produttività, competitività e sostenibilità delle principali filiere produttive italiane.

Vi ringrazio ancora per la fiducia e vi invito a partecipare attivamente alla vita della nostra Società. La SCI è forte quando è condivisa.

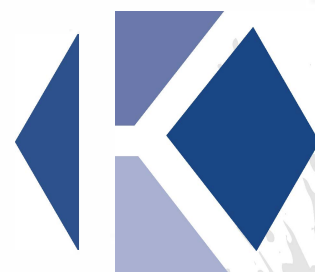


**REACH**

Consorzi, Registrazioni,  
Supporto Tecnico-Amministrativo-Legale

**POLIMERI**

Microplastiche, Nanomateriali



**KAHLBERG  
CONSULTING**

**VALUTAZIONE INTERFERENTI ENDOCRINI (ED)  
VALUTAZIONE DI PERSISTENZA / BIOACCUMULO  
MOBILITÀ / TOSSICITÀ  
PRODUCT SAFETY**

Regolamento CLP, SDS, Notifiche PCN e SCIP, SVHC

**KKDIK – REACH Turco**

**UK REACH**

**K-REACH – Corea**

**UA-REACH – Ucraina**

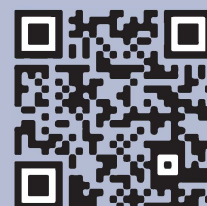
**UNA VISIONE STRATEGICA,  
OLTRE LA NORMATIVA**

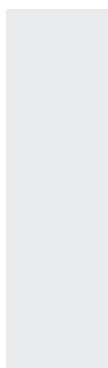
**New Approach Methodologies  
Grouping, Read Across, QSAR, OMICS**

Costruire insieme una strategia di testing che mira a ridurre i test, i tempi e i costi grazie a un team tecnico altamente qualificato composto da esperti in:

Chimica - Biologia - Tossicologia Umana e Ambientale  
- Valutazione del Rischio

**EUROPA - TURCHIA - UK - COREA - UCRAINA**  
**[www.kahlbergconsulting.com](http://www.kahlbergconsulting.com)**

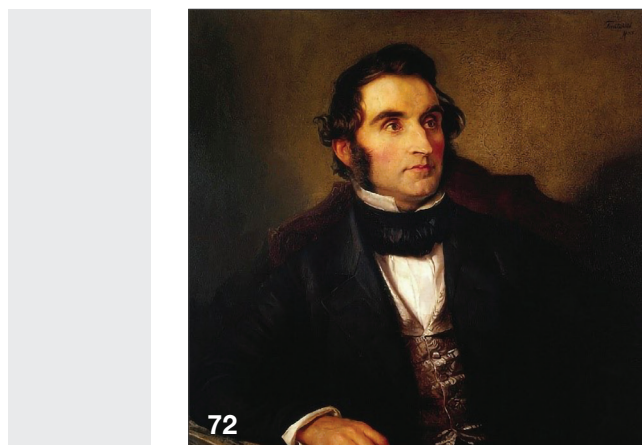
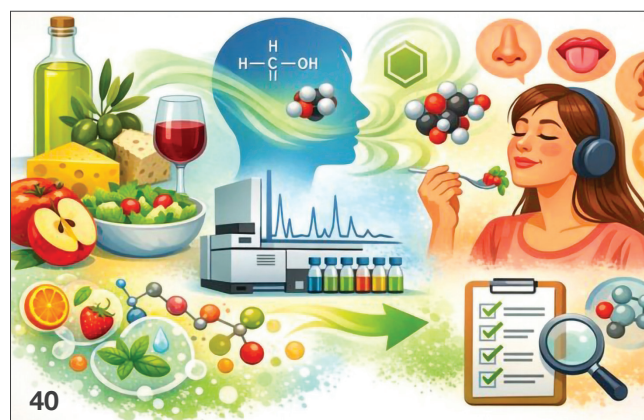
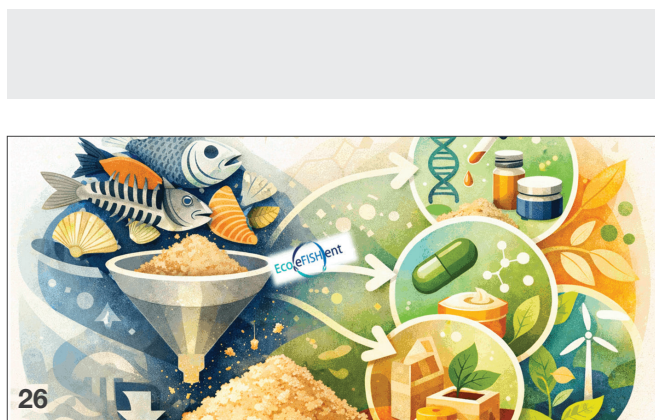




- 3 LETTERA DEL PRESIDENTE**  
**SCI: UN LEGAME SEMPRE PIÙ FORTE**  
 Luigi Mondello
- EDITORIALE**
- 9 QUALI SONO OGGI I COMPITI CHE HA LA CHIMICA DEGLI ALIMENTI? UNO SGUARDO SU ALCUNE RECENTI RICERCHE E APPLICAZIONI**  
 Nadia Mulinacci, Paola Montoro
- FOCUS SULL'INDUSTRIA CHIMICA**
- 11 LE INDUSTRIE CHIMICHE ATTIVE IN ITALIA NELLA PRODUZIONE DI ADDITIVI PER ALIMENTI**  
 Ferruccio Trifirò
- ATTUALITÀ**
- 14 LE 10 TECNOLOGIE EMERGENTI IN CHIMICA DI IUPAC 2025**  
 Paola Albanese, Francesca Cardano, Luca Consentino, Sara Fulignati, Tommaso Giovannini, Daniele Mazzarella, Nicola Mirota, Roberto Nisticò, Emilia Paone, Giacomo Trapasso
- CHIMICA & ALIMENTI**
- 20 SCIENZE OMICHE PER L'AUTENTICITÀ DELLE CARNI BIO**  
 Laura Alessandrini, Gianni Sagratini
- 26 IL VALORE NASCOSTO DEL PESCE A SPRECO ZERO**  
 Raffaella Boggia, Federica Grasso, Federica Turrini
- 32 LCxLC NELLA CHIMICA DEGLI ALIMENTI**  
 Francesco Cacciola, Katia Arena, Luigi Mondello, Paola Dugo
- 35 LA SPETTROMETRIA DI MASSA NELL'ANALISI DEGLI ALLERGENI "NASCOSTI" NEGLI ALIMENTI**  
 Roberta Galarini
- 40 COMPOSTI VOLATILI E SCIENZE SENSORIALI PER LA DEFINIZIONE DELLA QUALITÀ DEGLI ALIMENTI**  
 Rosaria Cozzolino, Cristina Matarazzo, Livia Malorni
- CHIMICA & AMBIENTE**
- 46 L'EREDITÀ AMBIENTALE DELLE MINIERE**  
 Marco Tagliabue, Camilla Lanari
- CHIMICA & TEORICA E COMPUTAZIONALE**
- 52 CATALISI A SINGOLO ATOMO: COSA CONTA DAVVERO**  
 Clara Saetta

- CHIMICA & INDUSTRIA**
- 54 DESIGN MOLECOLARE DI LUBRIFICANTI BIO-BASED**  
 Michele Emanuele Fortunato
- 57 STUDIO TERMICO DELL'UHMWPE BIOMEDICALE**  
 Luca Gianoglio, Pierangiola Bracco
- 60 SENSORI SMART: POLIMERI MECCANOCROMICI**  
 Giorgio Bancalà, Rob Duchateau, Andrea Pucci
- CHIMICA & ORGANICA**
- 63 APPROCCI MODERNI NELLA SINTESI ORGANICA**  
 Graziano Di Carmine
- 66 INNOVAZIONE NELL'ELETTROSINTESI ORGANICA**  
 Gabriele Laudadio
- CHIMICA & SISTEMI BIOLOGICI**
- 69 INVESTIGAZIONE DELL'INTERAZIONE BRCA2-RAD51**  
 Francesco Rinaldi
- PAGINE DI STORIA**
- 72 L'ESTRATTO DI CARNE DI LIEBIG: UN ESEMPIO DI APPLICAZIONE SOCIALE DELLA RICERCA SCIENTIFICA**  
 Antonella Maria Maggio
- 78 L'ISTITUTO GUIDO DONEGANI: UNA STORIA SECOLARE**  
 Carlo Perego, Palo Pollesel
- 85 RECENSIONI LIBRI**
- 86 DALLA LETTERATURA**  
 a cura di Silvia Cauteruccio e Monica Civera
- LA CHIMICA ALLO SPECCHIO**
- 88 IL CIBO ULTRAPROCESSATO FA MALE**  
 Claudio Della Volpe
- AIDIC**
- 91 NON IDEALITÀ E PRESTAZIONI IN REATTORI TUBOLARI**  
 Fabio Montagnaro





## DIRETTORE RESPONSABILE

Matteo Guidotti

## VICE-DIRETTORE

Mario Marchionna

## REDAZIONE SCIENTIFICA

Anna Simonini  
 Piazzale R. Morandi, 2 - 20121 Milano - tel. +39 345 0478088  
 anna.simonini@soc.chim.it

## COMITATO DI REDAZIONE

Laura Alessandroni, Catia Arbizzani, Tiziano Bandiera,  
 Silvia Bordiga, Franco Calascibetta, Martino Di Serio,  
 Matteo Guidotti, Mario Marchionna, Carmela Maria Montone,  
 Anna Simonini, Adalgisa Sinicropi, Paolo Vacca

## COMITATO SCIENTIFICO

Stefano Alcaro, Luigi Campanella, Alessandro Casnati,  
 Dario Compagnone, Mario Chiesa, Silvia Colombo, Claudio Gerbaldi,  
 Gaetano Guerra, Cristina Leonelli, Alessandra Magistrato,  
 Moreno Meneghetti, Paola Minghetti, Paola Montoro, Nadia Mulinacci,  
 Michele Pavone, Anna Maria Raspolli Galletti, Raffaele Riccio,  
 Margherita Venturi, Elisabetta Zendri

## DIRETTORE ONORARIO

Ferruccio Trifirò

## HANNO COLLABORATO

Claudio Della Volpe,  
 Silvia Cauteruccio, Monica Civera

## PROGETTO GRAFICO E IMPAGINAZIONE

Sara Moscardini

## CONCESSIONARIA DI PUBBLICITÀ

Agicom Srl  
 Viale Caduti in Guerra, 28 - Castelnuovo di Porto (Roma)  
 Tel. +39 06 9078285, fax +39 06 9079256  
 domeniacipriani@agicom.it  
 Skype: agicom.advertising

## EDITORE

PAS-SCI Srl  
 Roma

Reg. Tribunale di Milano n. 134 del 11/04/2017

ISSN 2283-544X

<https://www.societachimica.it/it/la-chimica-e-lindustria>

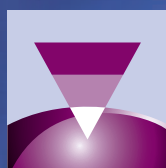




MESSE  
MÜNCHEN

# Immerse and discover: the world of the laboratory

**From laboratory technology and analysis to biotechnology and the analytica conference:** The lab world is evolving rapidly – and at analytica, you are at the center of progress. The World's Leading Trade Fair for Laboratory Technology, Analysis, and Biotechnology offers a complete market overview across 55,000 m<sup>2</sup>. Meet industry leaders and experts, discover world premieres, and find the perfect solution for your needs.



analytica

March 24–27, 2026

[analytica.de/en](https://analytica.de/en)





Nadia Mulinacci, Università degli Studi di Firenze  
Presidente della Divisione di Chimica degli Alimenti della SCI  
Paola Montoro, Università degli Studi di Salerno  
Presidente della Divisione di Spettrometria di Massa della SCI

# QUALI SONO OGGI I COMPITI CHE HA LA CHIMICA DEGLI ALIMENTI? UNO SGUARDO SU ALCUNE RECENTI RICERCHE E APPLICAZIONI



**L**a chimica degli alimenti è una scienza che si occupa di sistemi complessi, dove conoscenze scientifiche, innovazione e responsabilità etica devono necessariamente interagire, e che si occupa di autenticità, qualità e sicurezza attraverso la produzione e l'interpretazione di dati rigorosi. Anche la riduzione degli sprechi e la valorizzazione degli scarti agroalimentari aprono scenari sfidanti per trasformare uno scarto in risorsa, anche ad alto valore funzionale. La sostenibilità dei processi passa attraverso parametri chimici misurabili e verificabili lungo la filiera. Contaminanti, residui, frodi e biomarcatori di qualità si possono identificare e determinare con analisi sempre più sensibili e selettive. Oggi la chimica degli alimenti ha molte declinazioni, si evolve anche in una scienza predittiva, capace di anticipare rischi e ottimizzare processi grazie all'applicazione di tecniche analitiche avanzate capaci di acquisire una notevole mole di dati sperimentali. Fra queste, la cromatografia bidimensionale insieme alla spettrometria di massa permettono di esplorare i profili molecolari degli alimenti con una precisione senza precedenti. In questo numero sono raccolti sei contributi di chimici appartenenti alla Società Chimica Italiana ed

esperti in diversi campi di frontiera della chimica degli alimenti. Il numero affronta temi che spaziano dalla necessità di individuare nuovi strumenti che attestino una produzione biologica, al recupero degli scarti in itticoltura, alla molteplicità di applicazioni delle tecniche di cromatografia bidimensionale nella definizione di qualità e tracciabilità degli alimenti, agli allergeni "nascosti" negli alimenti, fino alla volatilità che aiuta a capire meglio il profilo sensoriale di un alimento ma anche le migliori modalità di conservazione. Infine, dal presente si fa un passo indietro nel 1800 per mostrare come è nata un'applicazione industriale dall'intuizione di un chimico. Con il contributo di Laura Alessandrini e Gianni Sagratini ci spostiamo sul tema della qualità della carne ovina proveniente da allevamenti biologici o tradizionali. La ricerca ha cercato di rispondere ad un quesito: è possibile verificare l'autenticità di una carne biologica? Una risposta sembra provenire dalle scienze omiche che si propongono di colmare il *gap* analitico in questo campo. Analizzando il proteoma delle carni mediante tecniche di spettrometria di massa integrata con strumenti bioinformatici, sono stati individuati dei possibili biomarcatori che distinguono il tipo di allevamento ed il genotipo, aprendo la strada allo sviluppo di strumenti analitici predittivi e controlli più affidabili.

Il tema della valorizzazione degli scarti è affrontato da Raffaella Boggia, Federica Grasso e Federica Turrini dell'Università di Genova, che ci presentano un focus sui processi di valorizzazione dei sottoprodotti dell'industria del pesce sviluppato nell'ambito di un progetto europeo con 34 partner. Che sia industria di cattura o di acquacoltura questa genera tonnellate di sottoprodotti, nella fattispecie teste,

pinne, ossa, ritagli, spesso sottoutilizzati. Si stima che solo un terzo dei sottoprodotti ittici generati a livello globale sia effettivamente recuperato e riutilizzato. Il contributo dimostra come queste biomasse indifferenziate, possano trasformarsi in ingredienti preziosi per nutraceutica, cosmetica e persino per un packaging sostenibile grazie ad un team capace di operare in ambiti di ricerca complementari e innovativi.

Francesco Cacciola, Katia Arena, Luigi Mondello e Paola Dugo dell'Università di Messina evidenziano le potenzialità ed i principali avanzamenti di tecniche analitiche separative nello studio di matrici alimentari complesse. Grazie alla distribuzione dei composti su di uno spazio bi-dimensionale è possibile ridurre le co-eluzioni migliorando parametri come risoluzione, selettività e quindi capacità di identificazione di specifiche molecole in matrici alimentari molto complesse ottenendo profili chimici più affidabili e informativi. Le potenzialità della cromatografia liquida multidimensionale (MD-LC) sono discusse mostrando la capacità di questi sistemi bi-dimensionali di mettere in luce la complessità compositiva di un alimento con alcuni esempi su fenoli, lipidi e peptidi bioattivi.

Nel contesto alimentare, e non solo, la spettrometria di massa costituisce il sistema di rivelazione più sensibile e quindi idoneo per la ricerca di molecole anche in bassa concentrazione all'interno di differenti matrici alimentari. Roberta Galarini, dell'Istituto Zooprofilattico Sperimentale dell'Umbria e delle Marche, mostra alcune delle grandi potenzialità di questa tecnica nell'analisi negli allergeni "nascosti" negli alimenti, talvolta dovuti a contaminazioni accidentali e che rappresentano un problema di salute pubblica. L'articolo descrive come la spettrometria di massa contribuisca ad affrontare il problema grazie alla sua estrema sensibilità, selettività e capacità di rilevazione simultanea di più allergeni. L'articolo evidenzia anche il ruolo complementare della spettrometria di massa rispetto ai test immunoenzimatici usati oggi nei controlli ufficiali di diversi allergeni.

Gli studi sulle molecole volatili che fortemente incidono sul profilo olfattivo-sensoriale di un alimento (volatilomica) sono illustrati da Rosaria Cozzolino, Cristina Matarazzo e Livia Malorni dell'Istituto di Scienze dell'Alimentazione del CNR di Avellino. Queste ricerche sono sempre più richieste per la valutazione della qualità degli alimenti e illustrano come



la volatilomica consenta di ottimizzare fattori pre- e post-harvest, processi di trasformazione e conservazione di alimenti e aiuti lo sviluppo di *novel food*. Facendo un passo nella storia, Antonella Maria Maggìo dell'Università di Palermo, ci racconta come Justus von Liebig nella prima metà dell'Ottocento trasformò la chimica in disciplina applicata ai processi vitali, mostrando la sua capacità di interpretare le trasformazioni biologiche per arrivare alla formulazione di un estratto di carne prodotto industrialmente. Il contributo ci mostra come Liebig partendo da un approccio sperimentale-quantitativo sia arrivato ad una applicazione industriale innovativa, segnando il passaggio dall'empiria alla moderna chimica degli alimenti.

Infine, un *hot topic* è quello degli alimenti ultraprocesati (UPF) proposta dal sistema "NOVA". Il mondo scientifico sta discutendo sulla necessità di rivedere l'attuale definizione e classificazione degli UPF. Un esempio in questo campo è il progetto UPDATE (Understanding Processed Foods and Their Health Effects) iniziato a gennaio 2025 e guidato da Susanne Bügel dell'Università di Copenhagen, che ha l'obiettivo di proporre una sorta di "NOVA 2.0". Gli obiettivi del progetto sono favorire sia futuri *trial* di intervento randomizzati di durata adeguata, sia il confronto scientifico fra coloro che hanno ideato la classificazione NOVA e coloro che ne chiedono una revisione. Restiamo quindi in attesa di vedere quali saranno gli sviluppi futuri.

Complessivamente questi contributi mostrano che il futuro del cibo, il controllo della sua qualità e la massima valorizzazione degli scarti delle nostre filiere alimentari, passa dalla comprensione profonda della struttura molecolare dei suoi componenti, delle loro interazioni durante i processi di trasformazione e conservazione e quindi da una sempre maggiore conoscenza chimica della matrice.



Ferruccio Trifirò

Professore Emerito Università di Bologna

ferruccio.trifiro@unibo.it

# LE INDUSTRIE CHIMICHE ATTIVE IN ITALIA NELLA PRODUZIONE DI ADDITIVI PER ALIMENTI



FEDERCHIMICA  
AISPEC

Associazione nazionale imprese  
chimica fine e settori specialistici

La chimica è presente in ogni fase della catena alimentare e, in un articolo di Federchimica [1], sono state ricordate numerose attività chimiche industriali legate al settore alimentare: fertilizzanti, agrofarmaci, prodotti biotecnologici, soluzioni per la nutrizione e il benessere degli animali da allevamento, materiali per l'imballaggio degli alimenti, gas industriali, inchiostri per packaging alimentare e ingredienti specialistici per l'industria alimentare (additivi). In questo articolo si analizzerà un comparto specifico ma cruciale, quello degli additivi alimentari, che contribuiscono in modo determinante alla sicurezza, alla qualità, alla conservazione e al gusto dei prodotti. Le industrie produttrici di additivi alimentari associate a Federchimica fanno capo all'AISPEC [2], una delle sue 18 associazioni, articolata in 13 gruppi. Quattro di questi gruppi operano direttamente nella filiera alimentare e saranno oggetto di questa trattazione: Materie prime per integratori alimentari e alimenti funzionali (Miaf), Additivi e coadiuvanti per alimenti, Amidi e derivati, Aromi e fragranze.

### Materie prime per integratori alimentari e alimenti funzionali (Miaf)

Il gruppo Miaf rappresenta circa 21 imprese, comprendenti filiali italiane di aziende multinazionali e piccole e medie imprese nazionali [3]. Tali industrie producono e commercializzano un'ampia gamma

di ingredienti per la formulazione di integratori alimentari, tra cui vitamine, amminoacidi, sali minerali, estratti vegetali, probiotici, omega-3 e fibre vegetali. Molti di questi prodotti trovano impiego anche nei settori farmaceutico e cosmetico.

Questi ingredienti [4] sono utilizzati negli alimenti per contribuire al mantenimento del benessere della persona, supportando le funzioni vitali dell'organismo. Gli integratori alimentari sono costituiti da fonti concentrate di nutrienti destinate a integrare la dieta quotidiana, compensando eventuali carenze o aumentando l'apporto di specifici elementi. Tra i prodotti più diffusi rientrano la vitamina B12, il collagene, il magnesio e il potassio, le vitamine del gruppo B e la vitamina D.

Gli alimenti funzionali, invece, apportano benefici aggiuntivi alla salute e al benessere. Il gruppo Miaf aderisce all'Associazione europea EU Specialty Food Ingredients.

### Gruppo additivi e coadiuvanti per alimenti

Questo gruppo rappresenta circa 30 imprese, italiane e multinazionali [5, 6], attive nella produzione e nella commercializzazione di additivi alimentari, enzimi, coadiuvanti tecnologici, ausiliari per l'enologia e altri ingredienti destinati all'industria alimentare, con l'obiettivo di migliorare le caratteristiche dei prodotti e prolungarne la durata.

Gli additivi alimentari, di origine naturale o sintetica, svolgono diverse funzioni: edulcoranti, che conferiscono dolcezza con ridotto apporto calorico; coloranti, che migliorano l'aspetto visivo; conservanti, che rallentano lo sviluppo dei microrganismi; antiossidanti, che prevengono ossidazione e variazioni di colore; correttori di acidità, che regolano il pH; addensanti, emulsionanti e stabilizzanti, che migliorano consistenza e omogeneità.

Nella lista positiva degli additivi figurano numerose sostanze di origine naturale, come acido citrico, lecitina, pectine, altri addensanti e tocoferoli. I coadiuvanti tecnologici (ad esempio gelatina alimentare e amido di mais) facilitano i processi produttivi e migliorano le caratteristiche tecnologiche degli alimenti, senza modificarne le proprietà organolettiche o nutrizionali, rendendoli più facilmente lavorabili. Essi sono impiegati nelle fasi di lavorazione, trasformazione, preparazione, trattamento e imballaggio degli alimenti.

Tutti questi prodotti sono sottoposti a rigorosi controlli e devono essere autorizzati dalle autorità competenti prima dell'impiego. Anche questo gruppo aderisce all'Associazione europea EU Specialty Food Ingredients.

## Amidi e derivati

In questo settore operano tre aziende [7, 9] specializzate nella produzione di amidi e derivati, quali destrosio, isoglucosio, sciroppo di glucosio, polioli e prodotti di fermentazione, come acidi organici e amminoacidi. L'amido, carboidrato complesso ottenuto da cereali come mais, frumento e riso, trova applicazione non solo come additivo alimentare, ma anche nei settori cosmetico, farmaceutico, tessile e cartario, nonché nella produzione di adesivi, plastiche, detersivi e in edilizia.

Nell'industria alimentare, l'amido e i suoi derivati svolgono una funzione strutturante, conferendo corpo e consistenza ai prodotti e favorendo la gelatinizzazione degli alimenti ad alta umidità, come pane, torte, pasta, patate cotte e verdure. Il gruppo aderisce all'associazione Starch Europe.

## Gruppo aromi e fragranze

Il gruppo rappresenta circa 50 imprese, italiane e multinazionali [10-11]. In questo articolo si considerano esclusivamente gli aromi, poiché le fragranze non sono utilizzate nel settore alimentare. Gli aromi servono a conferire o modificare odore e sapore di alimenti, bevande e mangimi animali, rendendoli più gradevoli, e trovano applicazione anche nella produzione di medicinali, cosmetici e tabacchi. Essi possono essere naturali, ottenuti da piante o ma-

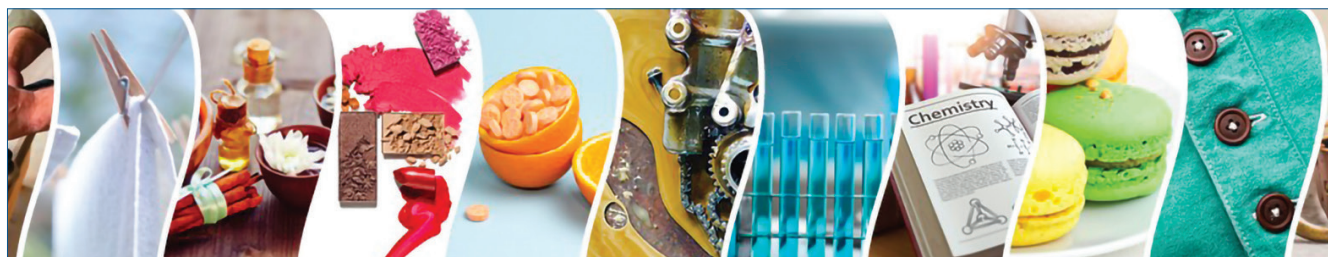
teriali di origine vegetale o animale mediante processi fisici, enzimatici o microbiologici, oppure sintetici, prodotti tramite sintesi chimica. In alimenti come bibite, snack e caramelle, l'aroma rappresenta spesso l'ingrediente caratterizzante, mentre in carne, gelati e liquori svolge generalmente una funzione complementare. Gli aromi e alcuni ingredienti alimentari con proprietà aromatizzanti, grazie anche alle loro caratteristiche antimicrobiche, contribuiscono in determinati prodotti a un elevato livello di tutela della salute umana e di protezione dei consumatori. Il gruppo aderisce a tre diverse associazioni europee.

## Conclusioni

Le industrie chimiche italiane attive nella produzione di ingredienti, additivi e coadiuvanti tecnologici per l'alimentazione svolgono un ruolo essenziale nel garantire qualità, sicurezza e innovazione lungo l'intera filiera agroalimentare. La loro partecipazione ad associazioni europee conferma il valore strategico del settore e l'importanza di una collaborazione internazionale continua.

## Bibliografia

- [1] **La chimica-nella-filiera-agroalimentare-Federchimica**
- [2] <https://www.federchimica.it/associazioni/aispec>
- [3] <https://aispec.federchimica.it/miaf/chi-siamo>
- [4] **Materie prime per integratori alimentari e alimenti funzionali - Cerca**
- [5] <https://aispec.federchimica.it/additivi-e-coadiuvanti-per-alimenti/chi-siamo>
- [6] **Additivi alimentari e coadiuvanti tecnologici: quali sono le differenze**
- [7] <https://aispec.federchimica.it/amidi-e-derivati/chi-siamo>
- [8] **Amido, la piccola grande risorsa - Fatti Non Fake - Federchimica**
- [9] **Amidi nativi e modificati**
- [10] <https://aispec.federchimica.it/aromi-e-fragranze/chi-siamo>
- [11] **Ministero della Salute. Aromi alimentari**

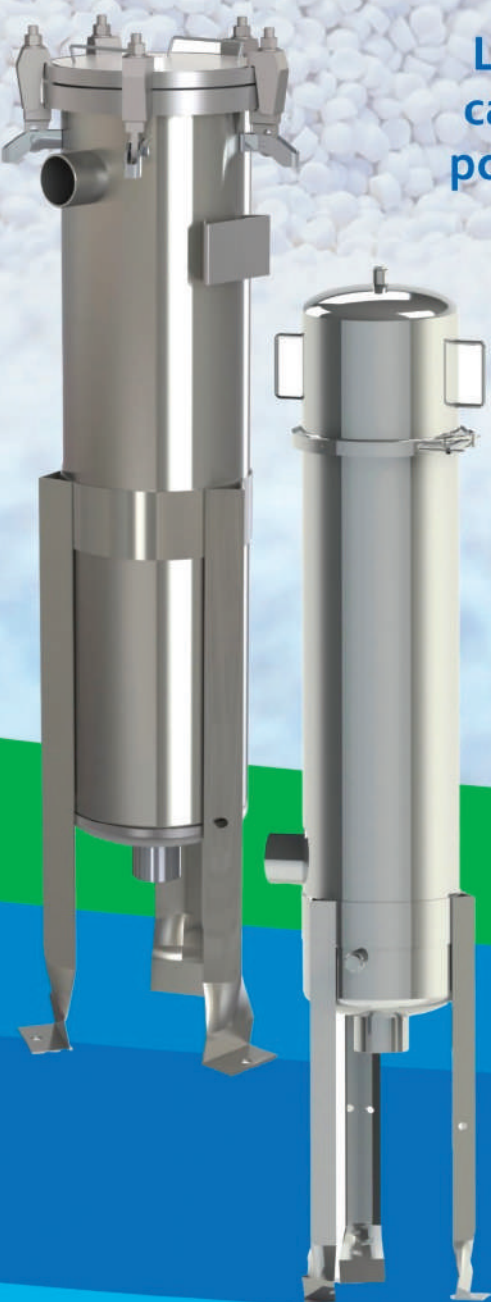




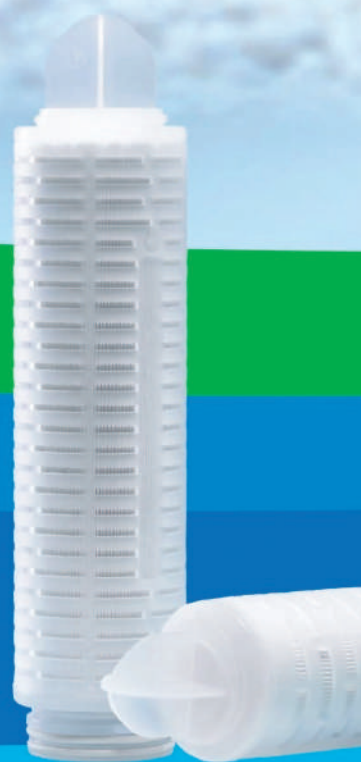


## ***Tecnologie di Filtrazione per il recupero ed il riciclo delle plastiche***

**Linea completa di filtri a sacco e a  
cartuccia per recupero particelle di  
polimeri solventi, acque di processo**



**Purification Control Technology**



Paola Albanese<sup>a</sup>, Francesca Cardano<sup>b</sup>, Luca Consentino<sup>c</sup>, Sara Fulignati<sup>d</sup>, Tommaso Giovannini<sup>e\*</sup>, Daniele Mazzearella<sup>f</sup>, Nicola Mirotta<sup>g</sup>, Roberto Nisticò<sup>h</sup>, Emilia Paone<sup>i</sup>, Giacomo Trapasso<sup>j</sup>

<sup>a</sup>Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia e Dipartimento di Scienze Fisiche, della Terra e dell'Ambiente, Università degli Studi di Siena

<sup>b</sup>Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Torino

<sup>c</sup>Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati, CNR, Palermo

<sup>d</sup>Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa

<sup>e</sup>Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Roma Tor Vergata, Roma

<sup>f</sup>Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Università degli Studi di Roma Tor Vergata

<sup>g</sup>MIMIT - Divisione V - "Materie prime, elettronica e fotonica" |

Direzione Generale per le nuove tecnologie abilitanti, Roma

<sup>h</sup>Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università degli Studi di Milano-Bicocca

<sup>i</sup>Dipartimento DICEAM, Università degli Studi Mediterranea di Reggio Calabria

<sup>j</sup>Dipartimento di Scienze Ambientali, Informatica e Statistica, Università Ca' Foscari Venezia

\*tommaso.giovannini@uniroma2.it

## LE 10 TECNOLOGIE EMERGENTI IN CHIMICA DI IUPAC 2025

*Per mettere in luce il contributo della chimica al progresso tecnologico, IUPAC seleziona ogni anno le Top Ten Emerging Technologies in Chemistry: dieci innovazioni con potenziale dirompente per affrontare alcune delle principali sfide globali. In questo articolo, i 10 Young Observers italiani (<https://www.iupac.cnr.it/it/young-observers>) presentano e discutono le tecnologie emergenti scelte per il 2025.*



### Introduzione

La chimica è chiamata a rispondere in modo concreto alle grandi sfide globali, quali crisi climatica, transizione energetica, sostenibilità delle filiere e nuove esigenze in ambito sanitario. In questo contesto, l'International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) non è solo il riferimento globale per standard, nomenclatura e linguaggio della disciplina, ma anche un punto di riferimento sulle innovazioni che possono diventare tecnologie del prossimo futuro.

Dal 2019, l'iniziativa "Top Ten Emerging Technologies in Chemistry" seleziona queste innovazioni per aumentarne la visibilità e favorirne il loro trasferimento tecnologico. Come ogni anno, anche le tecnologie selezionate nel 2025 spaziano da tematiche verdi, come materiali e processi più sostenibili, e soluzioni per cattura e valorizzazione della CO<sub>2</sub>, a strumenti digitali avanzati per prescreening computazionali (Fig. 1).

IUPAC riunisce 57 nazioni affiliate; per l'Italia la National Adhering Organization è il CNR (<https://www.iupac.cnr.it/>), che, tramite il programma Young Observers, promuove la partecipazione dei giovani ricercatori alle attività dell'Unione. Gli autori di questo articolo fanno parte della selezione italiana 2024-2025, e in questo articolo discutono le dieci tecnologie scelte per il 2025 [1].

### 1. Xolografia

La xolografia è una tecnica di stampa 3D volumetrica ad alta risoluzione che unisce la scienza dei materiali e la fotochimica per la stampa di componenti dalle più svariate matrici polimeriche con altissimo



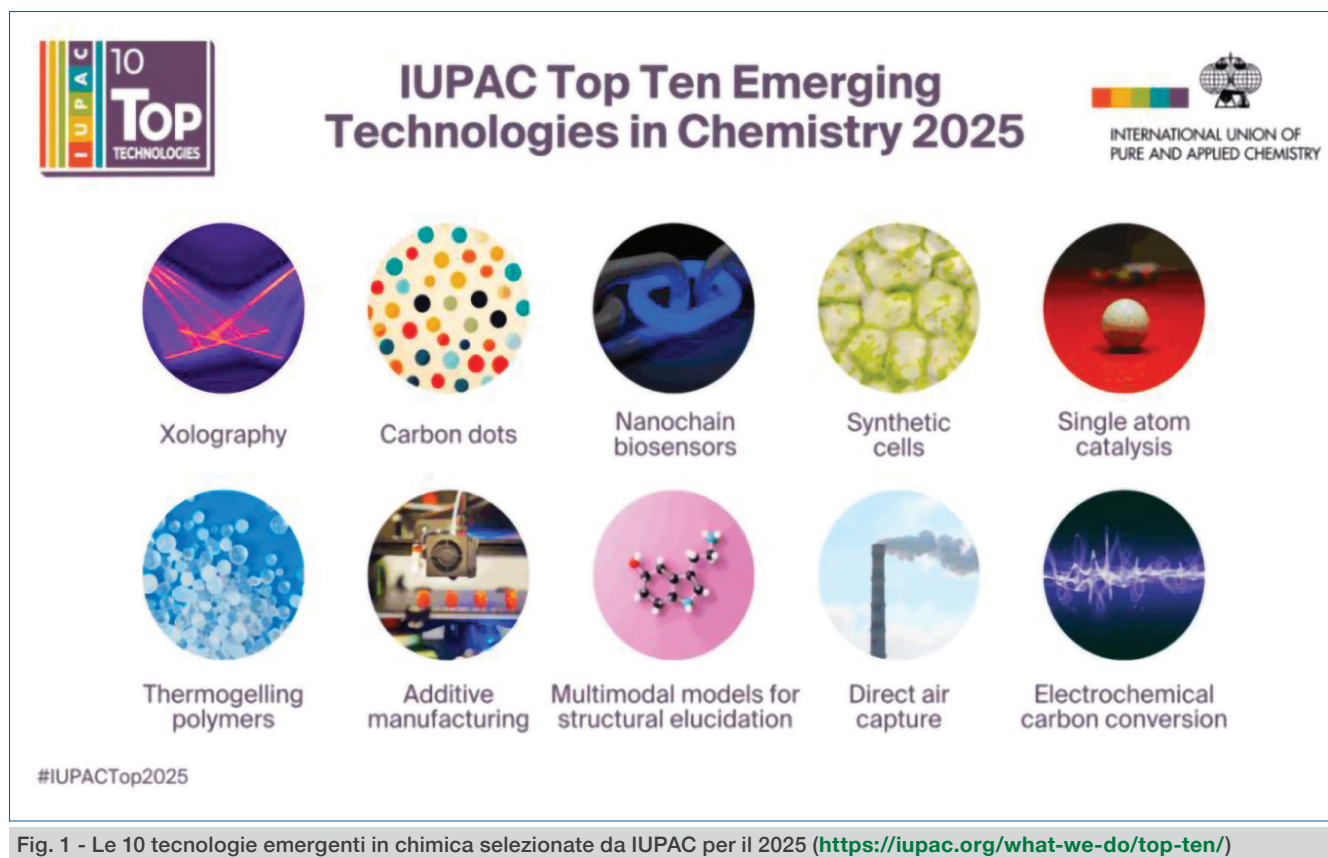


Fig. 1 - Le 10 tecnologie emergenti in chimica selezionate da IUPAC per il 2025 (<https://iupac.org/what-we-do/top-ten/>)

grado di definizione applicate nella produzione di materiali innovativi, componenti ottici e biomedicali [2, 3]. La xolografia sfrutta l'uso di due fasci di luce intersecanti e molecole foto-commutabili che consentono una polimerizzazione ad altissima risoluzione e precisione, garantendo un livello di dettaglio nel materiale stampato e nelle applicazioni potenziali senza precedenti (Fig. 2) [2, 4].

## 2. Carbon Dots

I carbon dots sono nanomateriali fluorescenti a base di carbonio che rappresentano un'alternativa più sostenibile ai quantum dots tradizionali [5]. Presentano varie strutture, da nuclei cristallini simili al grafene a forme amorfe o polimeriche, e sono caratterizzati da elevata stabilità, solubilità, bassa tossicità e facile funzionalizzazione chimica. Grazie alla fluorescenza modulabile e alla possibilità di funzionalizzazione mirata, trovano applicazione in sensing, bioimaging, rilascio di farmaci, terapie avanzate, catalisi ed energia, spesso attraverso processi produttivi basati su risorse rinnovabili [6].

## 3. Biosensori a nanocatena

Le nanocatene sono strutture composte da nanosfere di ossido di ferro e oro connesse chimicamente in maniera lineare a formare una catena, le cui superfici sono funzionalizzate con molecole specifiche [7]. Data la loro estrema sensibilità a campi magnetici, possono essere usati come sistemi di drug delivery guidabili tramite un campo magnetico esterno [8]. Le nanocatene possono anche essere applicate come barre di agitazione nei sistemi microfluidici per l'identificazione e la quantificazione ultrasensibile di biomarcatori proteici tumorali, con limiti di rilevabilità dell'ordine di ~10 ng/L [10], aprendo la strada a diagnosi cliniche più rapide e precise [9].

## 4. Cellule sintetiche

Le cellule sintetiche sono sistemi artificiali che ricreano, in modo semplificato, le funzioni fondamentali delle cellule viventi. Possono essere ottenute con un approccio top-down, che consiste nella progressiva riduzione della complessità genetica di cellule preesistenti, oppure bottom-up, basato sull'assemblag-



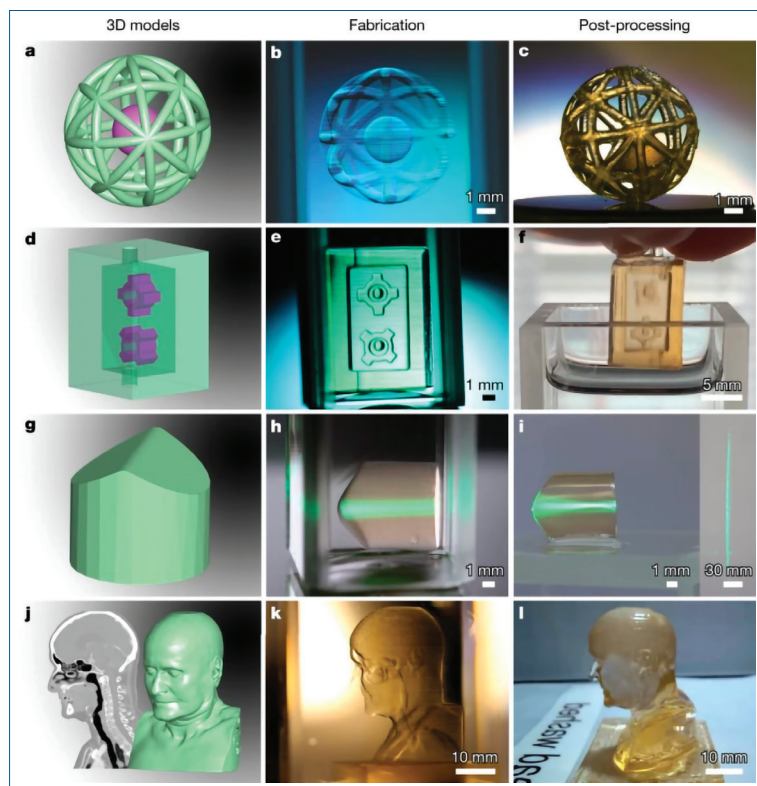


Fig. 2 - Modelli 3D (a, d, g, j) e immagini di oggetti realizzati tramite xolografia prima (b, e, h, k) e dopo (c, f, i, l) il post-processing. Immagine riprodotta da [2]

gio controllato di componenti molecolari in sistemi progressivamente più complessi [10-12]. Questa tecnologia apre prospettive scientifiche promettenti per lo studio dei meccanismi fondamentali della vita e per lo sviluppo di applicazioni avanzate: dal rilascio mirato di farmaci fino alla costruzione di bioreattori e piattaforme per la sostenibilità ambientale [10-12].

## 5. Catalisi a singolo atomo

I catalizzatori eterogenei rappresentano ancora oggi la tecnologia più diffusa nel settore industria-

le. Tradizionalmente, i siti catalitici attivi sono costituiti da nanoparticelle disperse su materiali di supporto. L'approccio innovativo della catalisi a singolo atomo si basa sull'utilizzo di atomi metallici isolati supportati. In questo modo, è possibile aumentare la reattività e la riciclabilità del catalizzatore, aumentando la sostenibilità dei processi [13], e la selettività, inibendo reazioni indesiderate [14]. Grazie a queste caratteristiche, i catalizzatori a singolo atomo stanno diventando soluzioni scalabili e adatte al mercato di massa (Fig. 3) [15].

## 6. Polimeri termogelificanti

I polimeri termogelificanti sono materiali che rispondono a stimoli esterni e subiscono una transizione sol-gel indotta dalla sola temperatura, passando da una soluzione fluida a un gel tridimensionale quando la temperatura raggiunge valori fisiologici [17]. Questa proprietà ne ha favorito l'impiego in ambiti quali la cosmetica, la diagnostica per immagini e il rilascio controllato di farmaci [18].

La chiave del loro successo è l'iniettabilità: somministrati come soluzioni liquide, gelificano spontaneamente *in situ*, consentendo un rilascio sostenuto di principi attivi o la formazione di impalcature per l'ingegneria tissutale. La ricerca attuale esplora inoltre applicazioni emergenti quali la bio-stampa 3D e la robotica soffice [19].

## 7. Manifattura additiva

Costruiamo il futuro, strato dopo strato: l'Additive Manufacturing sta rivoluzionando il modo in cui progettiamo e realizziamo la produzione [20]. Non

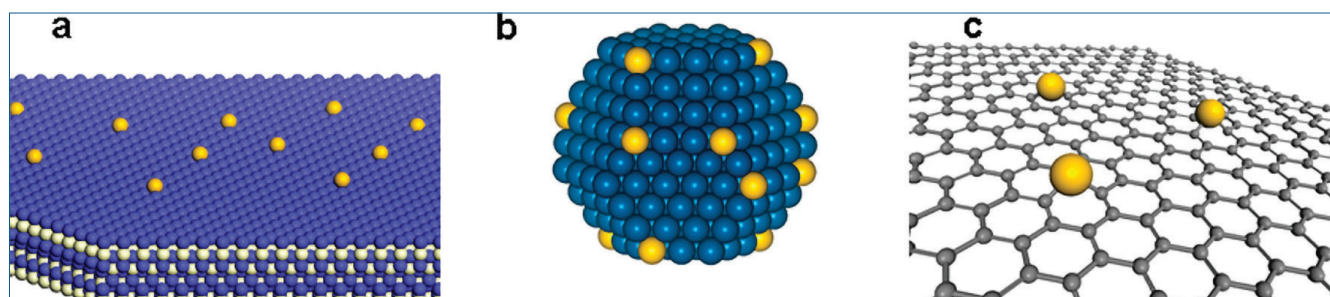


Fig. 3 - Diverse tipologie di catalizzatori a singolo atomo, dove atomi metallici isolati sono ancorati a (a) ossidi metallici, (b) nanosuperfici metalliche e (c) grafene. Immagine riprodotta da [16]

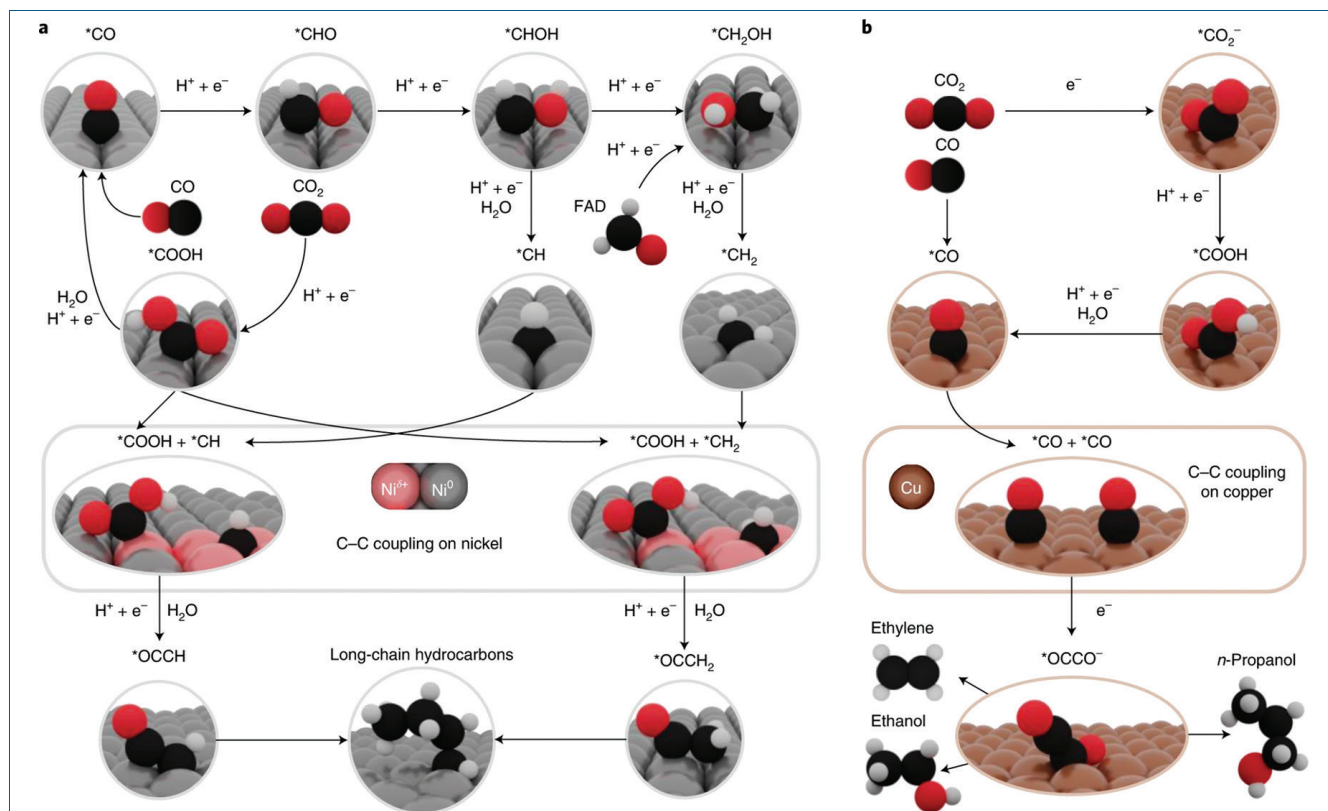


Fig. 4 - Esempi di coupling C-C tramite conversione elettrochimica dell'anidride carbonica sulla superficie di catalizzatori a base Ni (a) e Cu (b). Immagine riprodotta da [28]

è solo stampa 3D, ma un vero cambio di paradigma nella manifattura. Una trasformazione guidata dalla chimica, dove materiali innovativi, dai polimeri riciclabili ai metalli avanzati, prendono forma con precisione estrema e minimo spreco [21]. Dalla medicina rigenerativa all'aerospazio, questa tecnologia apre la strada a prodotti più leggeri, performanti e personalizzati, accelerando innovazione, efficienza e sostenibilità [22].

## 8. Modelli fondazionali multimodali per l'elucidazione strutturale

I modelli fondazionali multimodali basati su intelligenza artificiale per l'elucidazione strutturale integrano varie tecniche spettroscopiche (IR, NMR, UV e MS), superando metodi basati su singole tecniche, accelerando così l'assegnazione della struttura molecolare. In questo modo, permettono di ridurre sostanzialmente tempi e costi [23]. Sono addestrati su banche dati pubblici e dati brevettuali [24] e forniscono un supporto innovativo alla drug discovery, al design di nuovi materiali, al mo-

nitoraggio dell'inquinamento, al controllo qualità e all'analisi forense.

## 9. Cattura diretta dall'aria

La cattura diretta dall'aria (Direct Air Capture, DAC) rappresenta un'opzione strategica per ridurre la concentrazione atmosferica di CO<sub>2</sub> [25], attraverso l'adsorbimento reattivo su sorbenti basici con formazione di carbonati, ma con rigenerazione energivora, o su reticoli metallo-organici (MOF), materiali porosi "a spugna" con rigenerazione più facile. Quest'ultima soluzione è già arrivata ad impianti pilota e, talvolta, a dimostrazioni industriali [26]. Su scala globale la DAC è già operativa, con costi stimati <100 \$/ton di CO<sub>2</sub>, oltre le stime più ottimistiche dell'International Energy Agency.

## 10. Conversione elettrochimica della CO<sub>2</sub>

La conversione elettrochimica della CO<sub>2</sub> in combustibili e/o prodotti chimici, tra cui CO, CH<sub>4</sub>, metanolo e idrocarburi/alcoli a catena più lunga, rappresenta un importante passo in avanti nella valorizzazione

di un prodotto di scarto (e fonte di inquinamento atmosferico) quale la CO<sub>2</sub> in una fonte di carbonio ed energia [27]. Grazie ai recenti sviluppi nella scienza dei materiali e in catalisi è stato possibile effettuare il design di catalizzatori (tipicamente a base Cu e Ni) in grado di permettere la conversione della CO<sub>2</sub> in idrocarburi sempre più complessi confermando la potenzialità di questa tecnologia emergente [28] che può anche essere integrata con fonti rinnovabili (Fig. 4) [29].

## Conclusioni

Le tecnologie emergenti selezionate da IUPAC per il 2025 confermano il ruolo centrale della chimica nel rispondere alle grandi sfide globali, in particolare quelle legate alla sostenibilità, alla salute e alla transizione energetica. Come per l'edizione 2024 [29], la selezione evidenzia come la chimica sia tuttora una disciplina in rapida evoluzione, sempre più orientata verso soluzioni circolari, processi a basso impatto ambientale e materiali progettati con criteri di efficienza e responsabilità.

Un elemento trasversale alle ultime edizioni è la crescente integrazione di approcci digitali e computazionali, con l'intelligenza artificiale che sta diventando uno strumento chiave per accelerare l'analisi dei dati, l'elucidazione strutturale e l'innovazione in ambito chimico. Parallelamente, l'interdisciplinarietà emerge come fattore cruciale, con forti connessioni tra chimica, scienza dei materiali, biologia, ingegneria ed elettrochimica, come dimostrano le tecnologie per la cattura e la conversione della CO<sub>2</sub>, i nuovi materiali funzionali e i sistemi ispirati a strutture e funzioni di sistemi biologici.

Nel complesso, le innovazioni del 2025 evidenziano come la ricerca chimica grazie alla sua visione integrata possa trasformare idee emergenti in strumenti concreti per affrontare le esigenze della società e contribuire a un futuro più sostenibile.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] F. Gomollón-Bel, *Chem. Int.*, 2025, **47**, 6.
- [2] M. Regehy *et al.*, *Nature*, 2020, **588**, 620.
- [3] L. Stoecker *et al.*, *Adv. Mater.*, 2025, **37**, 2410292.
- [4] L. Stüwe *et al.*, *Adv. Mater.*, 2024, **36**, 2306716.
- [5] J. Ren *et al.*, *Adv. Sci.*, 2024, **11**, 2405472.
- [6] Z. Kang *et al.*, *Nanoscale*, 2019, **11**, 19214.
- [7] E. Karatahnasis *et al.*, *WIREs Nanomed. Nanobiotechnology*, 2016, **8**, 5.
- [8] S. Kralj *et al.*, *Pharmaceutics*, 2021, **13**, 8.
- [9] Q. Xiong *et al.*, *Nat. Commun.*, 2018, **9**, 1743.
- [10] W. Jiang *et al.*, *ACS Nano*, 2022, **16**, 15705.
- [11] S. Giavieri *et al.*, *Nat. Commun.*, 2025, **16**, 7488.
- [12] C.A. Hutchinson *et al.*, *Science*, 2016, **351**, aad6253.
- [13] M.A. Bajada *et al.*, *Cell Rep. Sustain.*, 2025, **2**, 100286.
- [14] S. Mitchell *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2018, **57**, 15316.
- [15] T.A. Gazis *et al.*, *ACS Catal.*, 2025, **15**, 6825.
- [16] X-F. Yang *et al.*, *Acc. Chem. Res.*, 2013, **46**, 1740.
- [17] H.A. Pearce, A.G. Mikos, *Curr. Opin. Biomed. Eng.*, 2022, **24**, 100412.
- [18] Z. Liu *et al.*, *Nat. Biomed. Eng.*, 2019, **8**, 598.
- [19] Q. Lin *et al.*, *Acc. Mater. Res.*, 2021, **2**, 881.
- [20] E. Sanchez-Rexach *et al.*, *Chem. Mater.*, 2020, **32**, 7105.
- [21] K. You *et al.*, *npj Adv. Manuf.*, 2025, **2**, 1.
- [22] T.D. Ngo *et al.*, *Compos. B Eng.*, 2018, **143**, 172.
- [23] M. Alberts *et al.*, *arXiv 2024*, arXiv.2407.17492.
- [24] Y. Su *et al.*, *arXiv 2025*, arXiv.2508.08441.
- [25] <https://www.iea.org/reports/direct-air-capture-2022>
- [26] X. Zhang *et al.*, *Carbon Capture Sci. Technol.*, 2023, **9**, 100145.
- [27] A.M. Zito *et al.*, *Chem. Rev.*, 2023, **123**, 8069.
- [28] Y. Zhou *et al.*, *Nat. Catal.*, 2022, **5**, 545.
- [29] M. Agliuzza *et al.*, *Appl. Energy*, 2023, **334**, 120649.
- [30] P. Albanese *et al.*, *La Chimica e l'Industria online*, 2025, **9**(1), 15.

## The 2025 IUPAC Top Ten

### Emerging Technologies in Chemistry

To showcase the role of chemistry in driving technological progress, IUPAC annually identifies the Top Ten Emerging Technologies in Chemistry: ten innovations with transformative potential to address major global challenges. In this article, the 10 Italian Young Observers (<https://www.iupac.cnr.it/it/young-observers>) present and discuss the emerging technologies selected for 2025.







# Vocus CI-TOF

## Misurazione in tempo reale di tracce di composti organici e inorganici volatili nell'aria



**Misure Real-time** - Segnalazione immediata delle concentrazioni di composti organici e inorganici volatili (VOC e VIC)



**Reattori intercambiabili** - Aumenta la gamma e la diversità dei composti rilevabili intercambiando i reattori PTR (Spettrometria di massa con reazione di trasferimento di protoni) e Aim



**Interfaccia di ingrandimento** - Trasferire gli ioni dal reattore Vocus all'analizzatore TOF con la massima efficienza possibile per una migliore sensibilità



**Separazione ad alta risoluzione** - Isobare separate per consentire un'analisi sicura e affidabile di miscele complesse



**Commutazione ionica rapida del reagente** - La commutazione degli ioni dei reagenti consente il monitoraggio in tempo reale utilizzando diversi ioni dei reagenti con un singolo reattore. I tempi di commutazione sono 50-100 ms per Aim Reactor e fino a 10 s per PTR Reactor



**Sorgente ionica del reagente VUV** - Sorgente ionica luminosa, sicura e robusta per la generazione di una varietà di ioni reagenti utilizzati in Vocus Aim



**Spettrometria di massa a mobilità ionica** - Monitoraggio in tempo reale delle popolazioni di isomeri con spettrometria di massa a mobilità ionica

Innovativa gamma di spettrometri Vocus CI-TOF di ToFwerk per rispondere alle esigenze di ricercatori e industrie che necessitano di uno strumento performante dal design robusto e compatto per applicazioni sia in laboratorio sia laddove si trovi il campione.

Vocus CI-TOF campiona direttamente l'aria per caratterizzare e quantificare i composti organici e inorganici volatili (VOC e VIC) in miscele complesse, in tempo reale, senza separazione cromatografica. Le tecnologie di ionizzazione rendono possibile l'identificazione dei composti di interesse. Lo spettrometro è configurabile con due reattori di ionizzazione chimica intercambiabili: Vocus PTR e Vocus Aim.

Soluzione performante per l'analisi diretta dei profili volatili di prodotti alimentari, principali responsabili delle proprietà organolettiche, dalla ricerca a vari ambiti nell'industria alimentare. Il monitoraggio in tempo reale consente di seguire l'evoluzione di un profilo aromatico per la caratterizzazione di composti chiave e off-flavours, il controllo qualità e lo sviluppo di prodotti.

MAGGIORI  
INFO



TOFWERK

**SRA**  
INSTRUMENTS  
ANALYTICAL SOLUTIONS

[www.srainstruments.com](http://www.srainstruments.com)



Laura Alessandroni, Gianni Sagratini  
Scuola di Scienze del Farmaco e dei Prodotti della Salute  
Chemistry Interdisciplinary Project (ChIP)  
Università di Camerino, Camerino (MC)  
laura.alessandroni@unicam.it, gianni.sagratini@unicam.it

<http://dx.medra.org/10.17374/CI.2026.108.1.20>

## SCIENZE OMICHE PER L'AUTENTICITÀ DELLE CARNI BIO

*Si può verificare l'autenticità di una carne biologica? Le scienze omiche si propongono di colmare il gap analitico in questo campo. Analizzando il proteoma delle carni è possibile individuare biomarcatori che ne distinguono il tipo di allevamento ed il genotipo, aprendo la strada a controlli più affidabili e strumenti predittivi per le aziende.*

### Perché servono nuove analisi per la carne biologica?

Negli ultimi anni il mercato dei prodotti biologici ha mostrato un trend in continua ascesa. Sostenuti da consumatori sempre più attenti alla sostenibilità, al benessere animale e alla trasparenza della filiera, i prodotti "bio" hanno registrato costanti aumenti nelle vendite sia sui mercati nazionali che su quelli internazionali, con i prodotti carnei tra i più distribuiti, in particolare le carni avicole (Fig. 1) [1, 2].

Per garantire il rispetto delle corrette pratiche di produzione, gli enti preposti effettuano controlli in ogni fase della filiera, dagli allevamenti ai mangimi-

fici, fino agli stabilimenti di trasformazione. Tuttavia, una volta che il prodotto arriva sul mercato, la tracciabilità rimane l'unico strumento a disposizione di intermediari e consumatori per verificarne l'effettiva "biologicità". Questo perché, ad oggi, manca uno strumento analitico capace di verificare se una carne commercializzata come "biologica" lo sia davvero. Infatti, analisi come la ricerca di residui di antibiotici, tradizionalmente utilizzate nei controlli ufficiali, non sono sufficienti: l'assenza di farmaci non è un criterio distintivo del biologico, poiché possono essere prodotte carni senza antibiotici anche in allevamento convenzionale, le cosiddette "antibiotic-free".

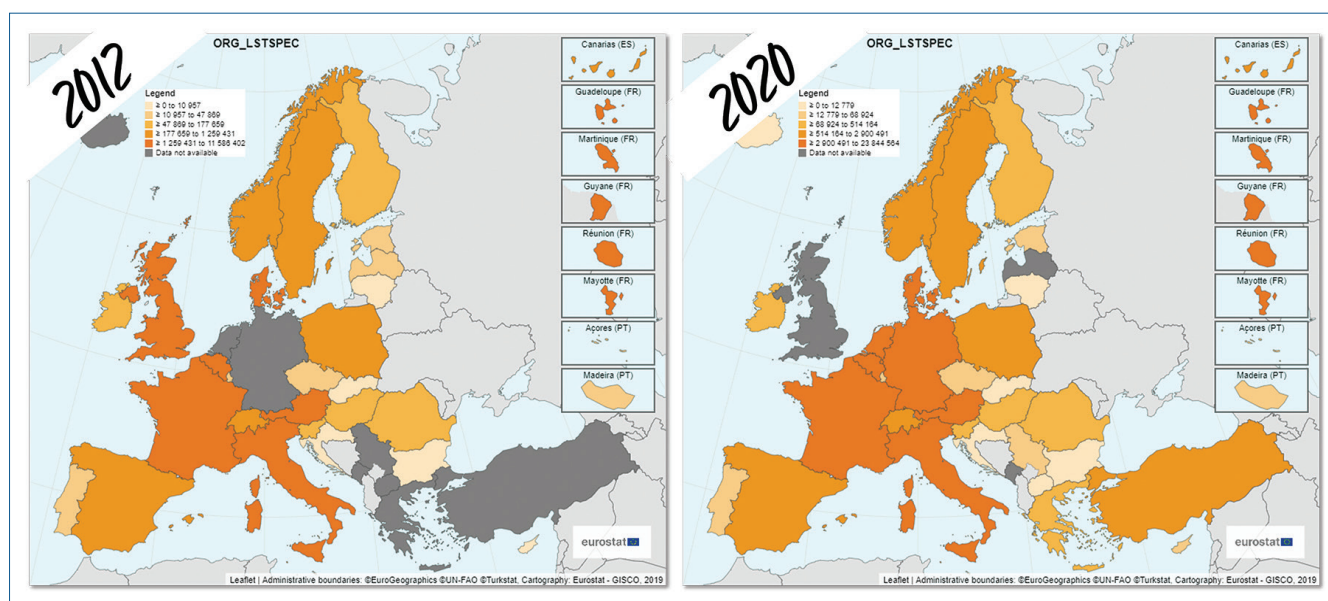


Fig. 1 - Distribuzione allevamenti biologici per carni avicole in Europa: confronto tra 2012 e 2020 (fonte EUROSTAT)

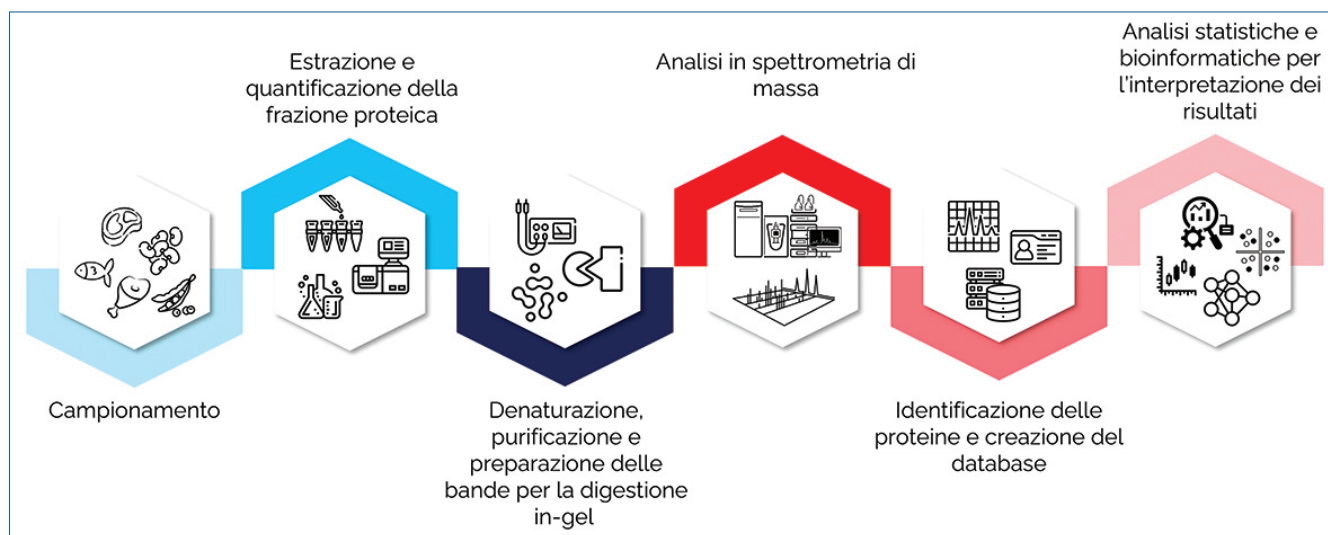


Fig. 2 - Rappresentazione schematica di un workflow generale per analisi proteomiche su matrici alimentari

### Ma allora qual è la differenza tra una carne biologica ed una antibiotic-free?

La risposta è molto più complessa di quanto si pensi. “Biologico” è molto di più che la semplice assenza di tracce di antibiotici. Produrre carne biologica significa gestire l'intera vita dell'animale ed i successivi processi di trasformazione con criteri precisi definiti dalla normativa europea 2018/848 [3]. La scelta di specifiche linee genetiche, l'alimentazione certificata, gli spazi adeguati, il libero accesso all'aperto, i ritmi circadiani, i tempi di crescita più lunghi e il benessere animale sono solo alcuni dei parametri regolamentati. Tutte queste condizioni influenzano profondamente il metabolismo dell'animale e, di conseguenza, la composizione molecolare dei suoi tessuti, quindi la qualità della carne.

Nonostante gli sforzi normativi e la crescente domanda, l'autenticazione delle carni biologiche a livello analitico rappresenta un divario ancora da colmare in quanto i metodi analitici tradizionali non sono in grado di restituire informazioni sull'alimentazione, sulla storia o sullo stile di vita dell'animale. Serve dunque un approccio nuovo, più complesso, capace di integrare informazioni ambientali, nutrizionali, genetiche e persino comportamentali.

In questo contesto, niente può fornire questo tipo di informazioni dalle carni meglio delle proteine, o meglio, del proteoma. Le proteine, infatti, sono le unità funzionali che costituiscono il motore cellulare, mentre il proteoma è stato definito come l'insieme completo di proteine caratterizzate in base alle

loro localizzazioni, interazioni, modifiche post-traduzionali e *turnover* in un dato momento della vita della cellula e/o per una specifica condizione. Dunque il proteoma è lo specchio dello stato fisiologico della cellula, del tessuto o dell'organismo: risponde allo stress, al movimento, al tipo di alimentazione, alla temperatura, alla crescita. Se cambia l'allevamento, cambia il proteoma [4, 5].

### Dal singolo composto alla visione d'insieme

Per decenni, la chimica in ambito alimentare ha lavorato alla ricerca di indicatori specifici: un residuo, un composto target, un gruppo di molecole. Questo approccio, pur fondamentale, soffre di un limite intrinseco: è mirato a ciò che già conosciamo. Purtroppo però, le frodi e le falsificazioni si evolvono più rapidamente dei metodi per scovarle, vista la complessità delle matrici in esame.

Dunque, per colmare questo *gap* servono strumenti nuovi e all'avanguardia. È qui che entra in gioco la grande famiglia delle scienze omiche: genomica, trascrittomica, proteomica e metabolomica. Attraverso queste metodiche, nate in ambito biomedico e ora sempre più presenti nella ricerca nutraceutico-alimentare, è diventato possibile identificare e quantificare migliaia di molecole contemporaneamente e studiare *pattern*, biomarcatori e relazioni metaboliche che non sono evidenti con approcci tradizionali. Nel caso specifico delle carni, assume fondamentale importanza soprattutto la proteomica [4, 5]. Questo approccio, infatti, permette l'analisi dell'intero proteoma di una cellula o di un tes-



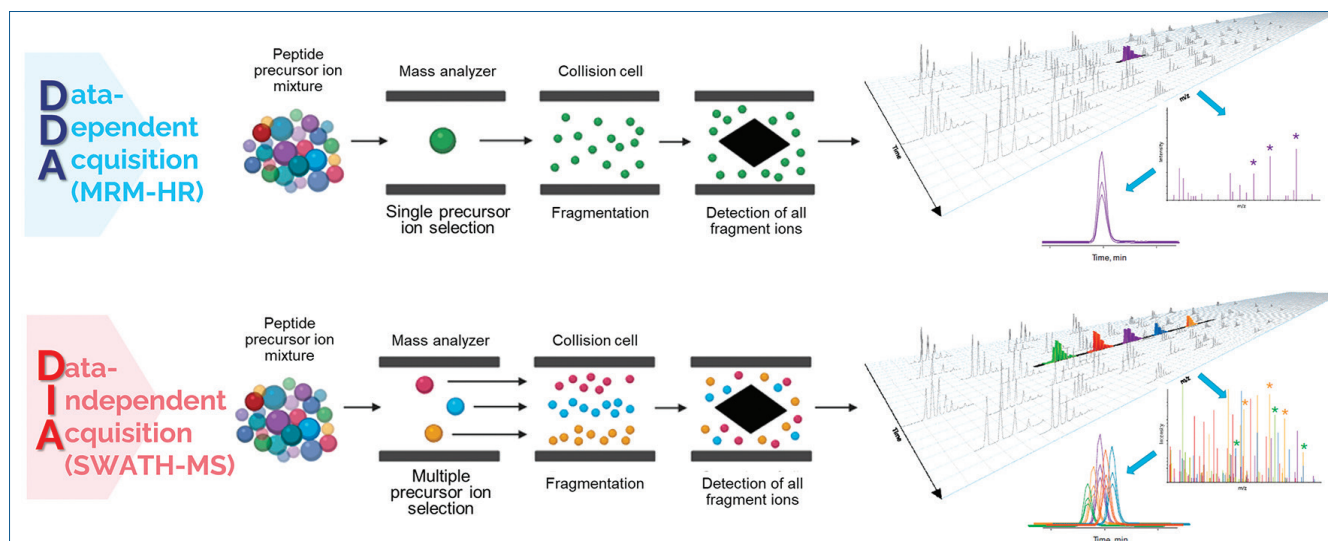


Fig. 3 - Confronto tra metodi di quantificazione basati sulla spettrometria di massa: rappresentazione schematica del metodo di acquisizione DDA mediante MRM ad alta risoluzione e dell'acquisizione DIA mediante la tecnica SWATH-MS [10]

suto, restituendo un vero “ritratto” della matrice in analisi come risultato del suo stato attuale e della sua storia. Il risultato è una mole di dati che, opportunamente integrata, può consentire di distinguere la carne biologica da quella convenzionale, andando molto oltre le analisi di routine.

I workflow delle analisi proteomiche si sviluppano principalmente in tre fasi: estrazione e separazione delle proteine dal tessuto per ridurre la complessità del campione, identificazione e quantificazione mediante spettrometria di massa, analisi dei dati con integrazioni statistiche e bioinformatiche (Fig. 2). Tutto ciò è possibile grazie agli avanzamenti tecnologici degli ultimi anni nel campo della spettrometria di massa. I nuovi strumenti ad alta risoluzione permettono un'accuratezza del dato  $m/z$  tale da poter ricorrere all'utilizzo delle banche dati per l'identificazione delle molecole [6].

### Il caso studio: il proteoma come discriminante tra carni avicole biologiche e antibiotic-free

Il lavoro di ricerca, sviluppato dal gruppo di Chimica degli Alimenti dell'Università di Camerino in partnership con l'azienda Fileni, leader italiano per la produzione di carni avicole biologiche, e in collaborazione con il Dr. Mohammed Gagaoua, esperto ricercatore in qualità dei prodotti e delle filiere della carne afferente al Teagasc - Agriculture and Food Development Authority (Dublino, Irlanda), è stato condotto con approcci complementari.

Un totale di 40 campioni di muscolo *Pectoralis major*, alle stesse condizioni post-mortem, sono stati forniti dall'azienda. Tutte le analisi sono state svolte tenendo in considerazione due sistemi di allevamento (biologico e antibiotic-free indoor) e due linee genetiche di pollo (Ross 308 - a rapida crescita e più comunemente usato per la produzione di carne - e Ranger Classic - genotipo ibrido a crescita più lenta). Inizialmente le differenze di espressione proteica sono state messe in luce mediante approccio tradizionale con elettroforesi bidimensionale (2D-PAGE) e successiva identificazione dei singoli spot proteici in spettrometria di massa (MS/MS) [6]. In questa prima analisi sono emerse interessanti differenze dovute sia alle disparità genetiche dei polli che ai diversi metodi di allevamento.

Sulla scia dei risultati ottenuti, gli studi successivi hanno utilizzato la proteomica “shotgun”, integrata con strumenti bioinformatici, per approfondire i meccanismi biologici alla base delle differenze proteiche nella carne di pollo, in relazione sia al sistema di allevamento sia al genotipo.

Il protocollo “shotgun” è una tecnica di preparazione del campione che si compone di diversi passaggi: estrazione, denaturazione e concentrazione delle proteine su gel SDS-PAGE, seguite da digestione in-gel con tripsina. I peptidi digeriti sono stati quindi separati mediante nanoLC e analizzati in uno spettrometro di massa high-speed Triple TOF 6600 (SCIEX, Foster City, CA) in modalità Data Independent Ac-



quisition (DIA) SWATH-MS (Sequential Window Acquisition of all Theoretical Mass Spectra) [7, 8].

Il principio di base della SWATH-MS è la divisione del range di  $m/z$  in una serie di intervalli a 25 Da, in modo da ottenere informazioni su tutti i frammenti ionici all'interno dell'intervallo di scansione ad altissima velocità. In breve, Q1 seleziona gli ioni, Q2 funge da camera di collisione per indurre la reazione di frammentazione, e gli ioni frammentati sono infine analizzati nel TOF [9].

Ciò si traduce in una co-frammentazione di ioni eluiti simultaneamente e genera spettri MS/MS altamente complessi, che devono essere deconvolti mediante approcci specifici di analisi dei dati (Fig. 3). Viene quindi utilizzata una libreria di spettri ionici per estrarre cromatogrammi in modo mirato e identificarli in base alle loro frammentazioni grazie ad un'accuratezza fino alla quinta cifra decimale del valore di  $m/z$ .

Vista la scarsità di studi sull'argomento, per questo lavoro, la libreria è stata costruita appositamente

in-house analizzando quattro soluzioni peptidiche (pool samples dei 4 gruppi) mediante Data-Dependent Acquisition (DDA) che prevede l'acquisizione in MS scan con intervallo 400-1250  $m/z$ , seguita da una scansione MS/MS da 100 a 1500  $m/z$  dei 65 ioni precursori più abbondanti, per un tempo di ciclo totale di 2,8 s. L'estrazione dei picchi è stata condotta utilizzando il componente aggiuntivo per il software PeakView (versione 2.2, Sciex, Redwood City, CA, USA) e MS/MS con SWATH Acquisition Micro-App (versione 2.0, Sciex, Redwood City, CA, USA). Solo i peptidi con un punteggio di confidenza superiore al 99% (match con il database Protein Pilot) sono stati inclusi nella libreria spettrale.

Dopo la creazione della libreria, i 40 campioni sono stati

iniettati singolarmente in modalità Data-Independent Acquisition (DIA). I dati sono stati elaborati utilizzando il software ProteinPilotTM 5.0.1 di Sciex che utilizza l'algoritmo ParagonTM per la ricerca nel database e ProgroupTM per il raggruppamento dei dati. Successivamente le proteine identificate sono state confrontate con il database Uniprot specifico la specie *Gallus gallus*.

Sono state identificate più di 600 proteine nei 4 gruppi di campioni analizzati. Un primo screening per il riconoscimento di potenziali biomarcatori mediante metodi chemiometrici di discriminazione tra i gruppi ha rivelato che ogni gruppo è caratterizzato da un profilo proteico distintivo, riconoscibile da algoritmi come la Partial Least Square - Discriminant Analysis (PLS-DA) (Fig. 4A).

I dati hanno mostrato interessanti somiglianze nel proteoma delle carni biologiche, seppur di diverso genotipo, con differenze significative rispetto al proteoma dei campioni antibiotic-free, rivelando che l'allevamento biologico può influenzare il proteoma

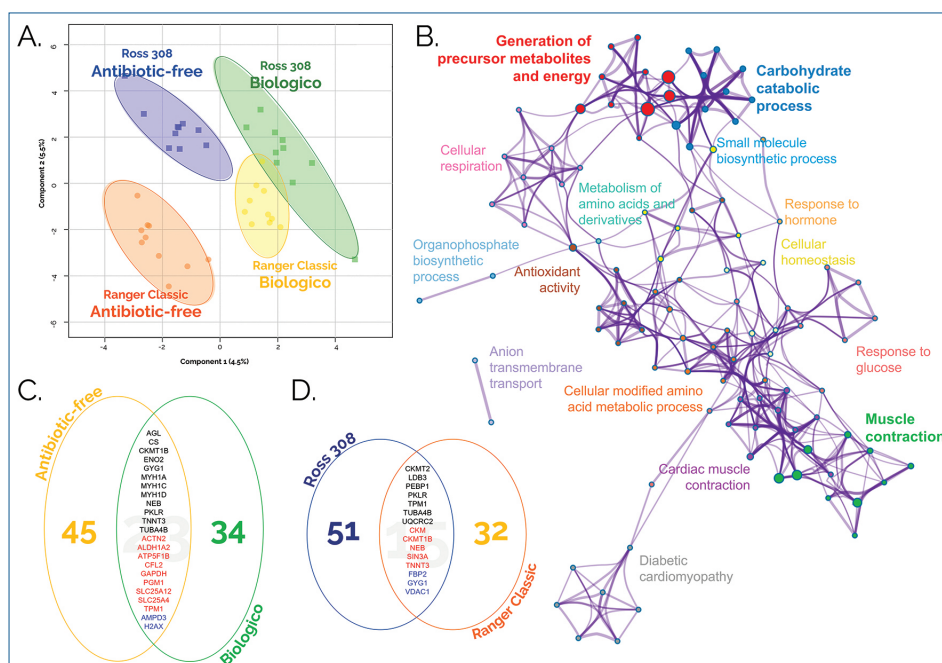


Fig. 4 - A) Partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) score plot relativo alla distribuzione dei 4 gruppi di campioni sulla base del proteoma analizzato; B) network layout basato sull'analisi bioinformatica dei pathways (Gene Ontology, KEGG, Reactome) delle proteine con VIP (Variable Importance in Projection) score >1. Ogni termine è rappresentato da un nodo la cui dimensione è proporzionale al numero di proteine che vi rientrano, e il colore rappresenta l'identità del cluster; C-D) diagrammi di Venn relativi alla sovrapposizione e al numero di proteine identificate come differenzialmente espresse in ogni gruppo. In rosso i gene names delle proteine sovra-esprese e in blu quelle sotto-esprese nei campioni Ranger Classic rispetto ai Ross 308 (C) e nei campioni biologici rispetto a quelli antibiotic-free (D)



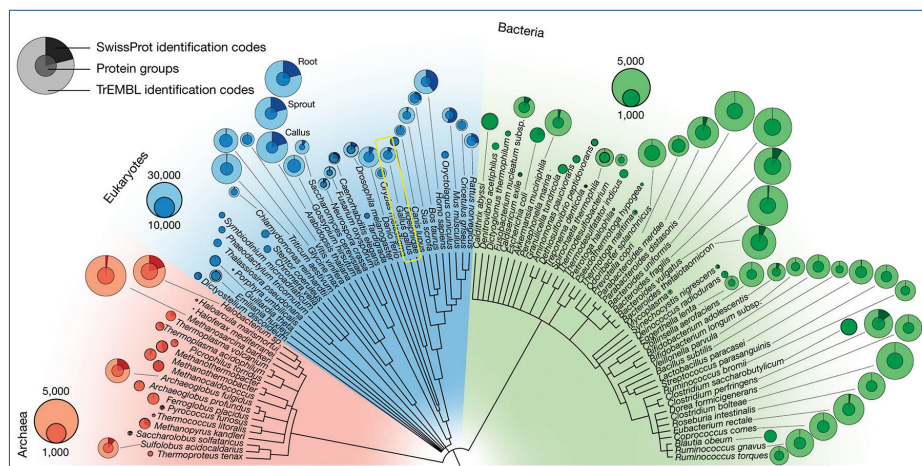


Fig. 5 - Panoramica sui database proteomici degli organismi ordinati e classificati in base alla tassonomia del National Center for Biotechnology Information (NCBI). I grafici a torta si riferiscono al numero di gruppi proteici (proteine distinguibili dai loro peptidi identificati) e alle voci proteiche revisionate e non revisionate di ciascun database [11]

muscolare in misura maggiore rispetto al sistema convenzionale indoor senza antibiotici. Sovra- o sotto-espressioni di proteine afferenti a *pathways* specifici, secondo la letteratura scientifica attuale, sono riconducibili ad una maggiore probabilità di ottenere carne con caratteristiche qualitative diverse [7-9]. Trattati distintivi sono stati riscontrati nel proteoma delle carni antibiotic-free, soprattutto di genotipo Ross 308. Questo ha riportato sovra-espressione di proteine relative a pathways di accrescimento muscolare e struttura delle miofibrille piuttosto che a quelli del metabolismo dell'ATP o di generazione di energia e metaboliti precursori, più espressi negli altri gruppi di campioni (Fig. 4B).

Il confronto tra i genotipi Ross 308 e Ranger Classic ha evidenziato differenze significative nel proteoma muscolare, in parte dovute al background genetico ma, secondo i nostri risultati, influenzate anche dalle condizioni di allevamento. Nel complesso, il sistema di allevamento ha dimostrato avere un impatto significativo sul proteoma della carne di pollo, con possibili implicazioni sulle proprietà nutrizionali e sensoriali della carne, nonché sulla sicurezza alimentare. I risultati hanno individuato diversi potenziali biomarcatori proteici da approfondire e validare attraverso un'adeguata pipeline di discovery (Fig. 4C e 4D). In particolare, 9 proteine (in rosso nella Fig. 4C) sono emerse come possibili biomarcatori del ceppo Ranger Classic e 2 proteine (in blu nella Fig. 4C) di Ross 308, poiché risultavano significativamente sovrae-

sprese in ciascun genotipo, indipendentemente dal sistema di allevamento.

Allo stesso tempo, il dato più rilevante, in ottica industriale, è che si sono delineati set di proteine in grado di discriminare la carne biologica da quella non biologica, indipendentemente dalla linea genetica. In particolare, 5 proteine nei campioni biologici (in rosso nella Fig. 4D) e 3 negli antibiotic-free (in blu nella Fig. 4D) sono risultate significativamente sovra-regolate nelle carni di ciascun sistema di produzione, indipendentemente dal genotipo dell'animale.

Queste proteine potrebbero rappresentare dei veri e propri biomarcatori di autenticità, cioè parametri oggettivi, misurabili e riproducibili. Per raggiungere tale obiettivo, saranno comunque necessarie ulteriori indagini di conferma utilizzando approcci proteomici mirati come analisi targeted di quantificazione con standard analitici (Multiple Reaction Monitoring, MRM o Parallel Reaction Monitoring, PRM).

D'altra parte, questo studio ha rappresentato la prima applicazione della proteomica alle carni di pollo biologiche. Nel corso del lavoro è emersa però una sfida significativa, legata al numero ancora limitato di proteine confermate nel database UniProt per *Gallus gallus*. Infatti, su 51565 codici, soltanto circa il 5% sono stati revisionati (SwissProt), e ne è quindi stata confermata la struttura, la funzione e la qualità dell'annotazione, mentre la restante parte è formata da sequenziamenti predittivi automatici e non revisionati manualmente (TrEMBL) (Fig. 5). Questo sicuramente ha reso meno immediata l'identificazione proteica, soprattutto perché si tratta di analisi ad ampio spettro. Tuttavia, con l'aumentare degli studi in questo ambito, il database si amplierà, garantendo in futuro dati sempre più robusti e affidabili.

## Ricerca e innovazione a servizio delle aziende

I risultati di questo studio suggeriscono prospettive molto interessanti per il settore avicolo, poiché mostrano come genetica e pratiche di allevamento influenzino profondamente la qualità della carne. La



scelta della linea genetica, ad esempio, può rappresentare un fattore strategico: secondo uno studio recente, i genotipi di pollo a crescita lenta, rappresentano il miglior compromesso nell'allevamento biologico, non solo nella qualità della carne ma anche dal punto di vista economico [12]. Capire come questi elementi si riflettano a livello molecolare permette di orientare in modo più consapevole le decisioni produttive.

Un altro aspetto di grande rilevanza riguarda la possibilità di individuare biomarcatori specifici della produzione biologica. Questi "segnali" molecolari potrebbero diventare strumenti utili per contrastare le frodi e per giustificare il maggior valore economico della carne biologica, offrendo ai consumatori una garanzia concreta sull'origine e sull'autenticità del prodotto acquistato. La ricerca in questo campo è ancora alle prime fasi, ma continuare ad ampliare le conoscenze consentirà, in futuro, di integrare questi approcci nei normali processi di controllo della qualità, rendendoli parte delle strategie aziendali di monitoraggio e certificazione.

Dunque l'applicazione delle scienze omiche non è solo un esercizio accademico: rappresenta un'opportunità concreta per le aziende del settore e può diventare una vera risorsa strategica in quanto consente di creare set di biomarcatori affidabili, ed utili lungo tutta la filiera, dal mangime al prodotto finito, migliorando trasparenza, sicurezza e tracciabilità e fornendo supporto alle certificazioni. L'integrazione con piattaforme digitali e sistemi di gestione dei dati potrà rafforzare ulteriormente questo valore, trasformando la narrazione del biologico in un'informazione oggettiva e verificabile sul prodotto finale. Nel lungo termine, l'unione di database di proteomica, metabolomica e genomica potrà aprire la strada a modelli capaci di rappresentare e simulare la realtà della matrice e anticipare le criticità. Questo sposterebbe i concetti di controllo qualità ed autenticità ad un livello predittivo diventando strumenti standard per garantire trasparenza e fiducia lungo tutta la filiera.

#### Nuovi metodi analitici verso un futuro sostenibile e consapevole

La sfida per la carne biologica è dunque scientifica, industriale e sociale. Le scienze omiche aprono prospettive innovative per identificare e certificare il valore aggiunto di questo prodotto, andando oltre

i limiti delle analisi tradizionali. L'investimento nella ricerca e nella sperimentazione di queste metodiche analitiche rappresenta una scelta di responsabilità verso il consumatore, in primis, e verso l'ambiente, evitando gli sprechi lavorando su modelli predittivi. Tutto ciò porterebbe allo sviluppo di prodotti animali autentici, tracciabili e sostenibili.

#### BIBLIOGRAFIA

- [1] European Commission - Agricultural and Rural Development, *Agricultural Market Brief*, 2023, **20**.
- [2] ISMEA Mercati, *Biologico - Ultime dal settore*, 2025.
- [3] European Commission, *Official Journal of the European Union*, 2018, **L 150**.
- [4] M. Gagaoua, W. Schilling *et al.*, *Encyclopedia of Meat Sciences*, 3<sup>rd</sup> Ed., Elsevier Ltd., Amsterdam, 2024, **3**, 513.
- [5] R. Pedreschi, M. Hertog *et al.*, *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.*, 2010, **50**, 680.
- [6] L. Alessandroni, G. Sagratini, M. Gagaoua, *Food Chem. Mol. Sci.*, 2024, **8**, 100194.
- [7] L. Alessandroni, G. Sagratini *et al.*, *Curr. Res. Food Sci.*, 2024, **8**, 100757.
- [8] L. Alessandroni, G. Sagratini, M. Gagaoua, *J. Agric. Food Chem.*, 2024, **72**, 20153.
- [9] C. Ludwig, L. Gillet *et al.*, *Mol. Syst. Biol.*, 2018, **14**, e8126.
- [10] A.N. Neagu, M. Jayathirtha *et al.*, *Molecules*, 2022, **27**, 2411.
- [11] J.B. Müller, P.E. Geyer *et al.*, *Nature*, 2020, **582**, 592.
- [12] K. Obremski, J. Tyburski *et al.*, *Agriculture*, 2023, **14**, 10.

#### Omics Sciences for Organic Meat Authenticity

Can the authenticity of organic meat be verified? Omics sciences aim to fill the current analytical gap in this field. Analyzing meat proteomes allows the identification of biomarkers that can discriminate farming systems and genotypes, paving the way for more reliable controls and predictive tools for the industry.



# IL VALORE NASCOSTO DEL PESCE A SPRECO ZERO

***Ogni anno l'industria del pesce, sia esso di cattura o di acquacoltura, genera tonnellate di sottoprodotti - teste, pinne, ossa, pelle e ritagli - spesso smaltiti o sottoutilizzati, con conseguenze economiche e ambientali rilevanti. Ma cosa succederebbe se queste biomasse indifferenziate potessero trasformarsi in ingredienti preziosi per nutraceutica, cosmetica e persino per packaging sostenibile? La ricerca dimostra che questa visione è possibile.***



## Introduzione

La produzione alimentare globale è in costante aumento e, parallelamente, cresce in modo significativo la quantità di scarti generati lungo le diverse fasi delle filiere produttive. Secondo le stime della FAO e dell'UNEP [1, 2], ogni anno oltre un miliardo di tonnellate di alimenti viene sprecato a livello mondiale, con impatti rilevanti sotto il profilo ambientale, economico e sociale.

Il settore ittico rappresenta uno degli ambiti più critici in questo contesto. Dal 1961, la produzione globale di pesce ha registrato un tasso medio di crescita pari a circa il 3% annuo, con un conseguente incremento dei sottoprodotti generati durante le fasi di trasformazione industriale. Nel 2025, la produzione mondiale di prodotti ittici - comprendente sia la pesca di cattura sia l'acquacoltura - è stata stimata dalla FAO in circa 197 milioni di tonnellate, con un aumento dell'1,7% rispetto al 2024 [3].

I sottoprodotti derivanti dalla lavorazione ittica comprendono sia catture indesiderate o accessorie, sia frazioni comunemente considerate non edibili o di basso valore commerciale, quali teste, pelli, lisce, ossa, viscere e residui di sfilettatura. In funzione della specie, del metodo di pesca e delle tecnologie di trasformazione adottate, tali biomasse residue possono rappresentare dal 20% fino al 70% del peso iniziale del pesce.

Nonostante il loro elevato potenziale nutrizionale e funzionale - dovuto alla presenza di proteine strutturali e bioattive (come collagene, gelatina, chitina ed enzimi), lipidi di alta qualità nutrizionale (in particolare acidi grassi mono- e polinsaturi), minerali essenziali (calcio, fosforo e ferro), vitamine liposolubili (A e D) e numerosi composti bioattivi (tra cui peptidi e carotenoidi) - questi materiali risultano ancora prevalentemente destinati ad applicazioni a basso valore aggiunto. Tra le principali destinazioni figurano la produzione di mangimi, fertilizzanti e biogas [4, 5].

A livello internazionale, solo una frazione limitata dei composti bioattivi o funzionali recuperati trova impiego in applicazioni ad alto valore aggiunto destinate al consumo umano, quali i settori nutraceutico, farmaceutico e cosmetico.

I livelli più avanzati di recupero si riscontrano in aree a forte vocazione industriale, in particolare in Asia (con la Cina tra i principali attori) e in Nord America;





## EcoeFISHent project

Demonstrable and replicable cluster implementing systemic solutions through multilevel circular value chains for eco-efficient valorization of fishing and fish industries side-streams

**Funding instrument and scheme**  
Horizon 2020 - Innovation Action

**Grant agreement ID:**  
101036428

**Call for proposals:**  
H2020-LC-GD-2020 (Building a low-carbon, climate resilient future: Research and innovation in support of the European Green Deal)

**Topic:**  
LC-GD-3-2-2020 - Demonstration of systemic solutions for the territorial deployment of the circular economy

**Start date**  
1 October 2021

**End date**  
30 September 2026

**Total cost:** € 18 583 714,47

**EU contribution:** € 15 145 267,12

As the horizon 2020 program defined several priority challenges where targeted investment in research and innovation can have a real impact benefitting the citizen, the project was funded under the "Climate action, Environment, Resource Efficiency and Raw Materials" one.

**Coordinator**  
Filse

**Partners**

Fig. 1 - Il progetto EcoeFISHent <https://ecofishent.eu/>

in Europa, la Norvegia rappresenta un caso di riferimento. Complessivamente, le analisi di settore indicano che solo circa un terzo dei sottoprodotti ittici generati a livello globale viene effettivamente recuperato e riutilizzato, evidenziando un ampio margine di miglioramento in termini di efficienza, sostenibilità e valorizzazione delle risorse [6].

Le principali limitazioni alla valorizzazione di tali residui sono riconducibili alla loro elevata instabilità microbiologica e chimico-fisica, legata principalmente all'alto contenuto di acqua, nonché ai costi operativi associati alle fasi di raccolta, stoccaggio e logistica. A queste criticità si aggiungono vincoli normativi, la necessità di separare le diverse frazioni anatomiche - operazioni che incidono significativamente sulla sostenibilità economica dei processi - nonché l'elevata variabilità compositiva dei sottoprodotti. Ulteriori ostacoli derivano infine dalla persistenza di modelli produttivi prevalentemente lineari o ad elevato impatto ambientale [7, 8].

In tale contesto, emerge con forza la necessità di sviluppare strategie e soluzioni tecnologiche innovative in grado di trasformare una criticità ambientale in una risorsa, in linea con i principi dell'economia circolare e dei modelli di bioraffineria a spreco zero.

### Il progetto EcoeFISHent per la valorizzazione delle biomasse ittiche sottoutilizzate

In questo contesto si colloca EcoeFISHent, un progetto europeo finanziato nell'ambito del programma Horizon 2020 - Green Deal (Grant Agreement n. 101036428), finalizzato alla valorizzazione dei residui ittici ancora sottoutilizzati attraverso l'implementazione di modelli avanzati di economia circolare. L'iniziativa coinvolge 34 partner provenienti da 8 Paesi europei, con F.I.L.S.E. SpA nel ruolo di capofila, e rappresenta un esempio concreto di integrazione tra ricerca, industria e politiche europee (Fig. 1). Il progetto adotta un approccio integrato basato su sei *Cluster Value Chains*, ciascuno volto al recupero, riutilizzo e valorizzazione dei sottoprodotti, e all'ottimizzazione dei flussi collaterali lungo la filiera ittica, con l'obiettivo di massimizzare l'efficienza delle risorse e ridurre gli sprechi.

Le prime tre catene di valore si concentrano, in particolare, sulla conversione delle biomasse organiche in prodotti ad alto valore aggiunto, quali integratori alimentari, ingredienti cosmetici e materie prime per la produzione di imballaggi bioplastici compostabili. Tali catene sono state sviluppate e validate attraverso due casi studio rappresentativi di produzio-



Fig. 2 - Prodotti ad alto valore aggiunto ottenuti nel progetto EcoeFISHent

ni tipiche italiane, ma potenzialmente replicabili in altri contesti geografici: l'industria conserviera del tonno e la filiera dell'acquacoltura di orate e spigole. Nel caso del tonno, le più recenti stime indicano che fino al 70% del prodotto lavorato viene scartato durante le fasi di trasformazione industriale, generando circa 22 milioni di tonnellate di sottoprodotti ogni anno [9].

Uno degli elementi chiave del progetto EcoeFISHent è lo sviluppo di processi innovativi di lavorazione e

conservazione progettati per preservare le proprietà dei sottoprodotti ittici non separati, evitando la necessità di distinguere le diverse frazioni anatomiche. Questo approccio consente di stabilizzare le biomasse nel tempo e al contempo di semplificarne la gestione logistica, che rappresenta uno dei principali ostacoli alla valorizzazione dei residui organici quando le fasi di produzione e trasformazione non sono co-localizzate.

Grazie a tali soluzioni tecnologiche, biomasse altamente deperibili possono essere efficacemente recuperate e potenzialmente impiegate in una pluralità di ambiti applicativi, secondo una logica di *upcycling* (Fig. 2).

Le biomasse organiche oggetto di studio vengono infatti recuperate integralmente - senza separazione tra pelle, teste e lisce - e sottoposte a un processo industriale di disidratazione *mild*, brevettato da uno dei partner del progetto e realizzato mediante macchinari dedicati [10]. Questo trattamento consente di ottenere una matrice stabile sotto forma di polvere o pasta, la cui sicurezza e qualità sono verificate attraverso un rigoroso monitoraggio microbiologico e chimico, condotto in conformità alle *Good Manufacturing Practices* (GMP) delle filiere di potenziale destina-



Fig. 3 - Il processo di valorizzazione dei flussi collaterali delle filiere ittiche

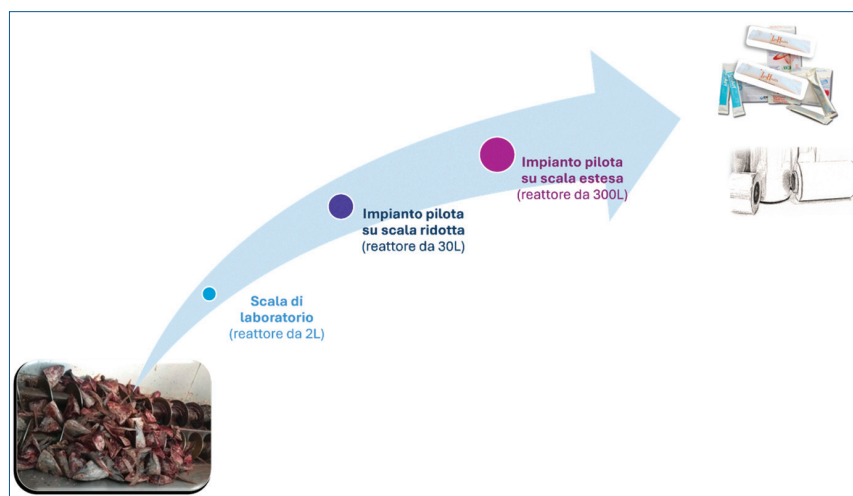


Fig. 4 - Lo scale-up del processo estrattivo

zione, in particolare quelle alimentare e cosmetica. A partire da questa matrice, mediante un impianto appositamente progettato nell'ambito del progetto EcoeFISHent, vengono estratti composti bioattivi ad elevato valore aggiunto. Dopo adeguati processi di purificazione, caratterizzazione e formulazione, tali composti sono valutati sia per la loro bioattività - inclusi effetti antiossidanti, *anti-aging*, antiipertensivi ed epatoprotettivi - sia per le loro proprietà tecnologiche, quali capacità emulsionanti e schiumogene, nonché caratteristiche reologiche funzionali alla filmatura, allo stampaggio e ad altre applicazioni industriali. Tutte le fasi (Fig. 3) sono controllate microbiologicamente e chimicamente per garantire sicurezza e qualità.

#### **Estrazione ecocompatibile assistita da enzimi per l'isolamento di proteine e lipidi di alto valore aggiunto**

Approfondendo la fase estrattiva, nei primi anni del progetto la collaborazione tra i partner di EcoeFISHent ha permesso lo sviluppo di processi innovativi e sostenibili per valorizzare i sottoprodotti ittici, basati su due approcci complementari: la trasformazione dei residui di tonno pinna gialla (*Thunnus albacares*) in ingredienti proteici ad alto valore aggiunto [11-13] e la produzione di idrolizzati proteici a basso peso molecolare e di oli ricchi in acidi grassi omega-3 dai sottoprodotti dell'acquacoltura di orata (*Sparus aurata*) e spigola (*Dicentrarchus labrax*) [7, 14, 15].

L'innovazione principale consiste nella messa a punto di un processo di estrazione "a cascata"

assistito da enzimi, capace di recuperare in modo efficiente ed eco-compatibile diverse frazioni funzionali dalla biomassa ittica disidratata e non selezionata, confermata dal laboratorio alla scala pilota (Fig. 4). Il processo consente di isolare quattro frazioni: proteine non collageniche (concentrati, isolati e idrolizzati proteici), gelatina, peptidi idrolizzati di gelatina/collagene e oli di pesce. Questo approccio valorizza integralmente la biomassa, in linea con i principi dell'economia circolare e della chimica verde. L'efficienza e la sostenibilità, comprese estrazione

enzimatica (EAE), purificazione a membrana e *spray-drying*, sono state confermate da studi di *Life Cycle Assessment* (LCA), che hanno identificato l'EAE quale tecnologia più vantaggiosa rispetto ad altre metodologie investigate nell'ambito del progetto, tra cui l'estrazione con fluidi supercritici (SFE), l'estrazione assistita da ultrasuoni (UAE) e l'estrazione assistita da microonde (MAE).

La caratterizzazione chimico-fisica dei prodotti ottenuti, sia dai sottoprodotti del tonno sia da quelli dell'acquacoltura di orata e spigola, mostra elevata qualità proteica e ampia versatilità applicativa [11-15]. Le frazioni proteiche presentano contenuti proteici molto elevati (90-93% per gelatina e peptidi di collagene del tonno, >80% per idrolizzati proteici di orata e spigola) e un profilo amminoacidico equilibrato, con circa il 40% di amminoacidi essenziali, inclusi i BCAA, fondamentali per il metabolismo muscolare. Il basso contenuto di ceneri indica purezza elevata e rimozione efficace delle componenti minerali indesiderate.

La gelatina marina estratta dai residui di tonno mostra struttura compatibile con un'origine collagenica e buone proprietà reologiche, come viscosità e capacità gelificante. Negli idrolizzati proteici di orata e spigola, le frazioni ad alto peso molecolare (retentati da filtrazione a membrana) presentano eccellenti proprietà tecnologiche, tra cui attività emulsionante, capacità schiumogena e legante con i lipidi, rendendole promettenti come ingredienti funzionali alimentari. Queste caratteristiche le rendono inoltre interessanti per applicazioni non alimentari, come il *packaging* biodegradabile.



Le frazioni a basso peso molecolare (permeati) e i peptidi idrolizzati del tonno, più facilmente digeribili e assorbibili, mostrano profili cromatici chiari e profili olfattivi più neutri, ideali per applicazioni nutraceutiche e cosmetiche. Questi peptidi possiedono significative attività biologiche, tra cui effetti antiossidanti, epatoprotettivi, inibizione dell'enzima ACE e promozione della cicatrizzazione, supportando il loro potenziale impiego come ingredienti nutraceutici o attivi cosmetici.

Un ulteriore aspetto di rilievo riguarda la sicurezza dei prodotti ottenuti: le analisi condotte dimostrano che essi risultano non solo microbiologicamente sicuri, ma anche pienamente conformi ai limiti europei per i contaminanti chimici, inclusi metalli pesanti, diossine e PCB, confermandone l'idoneità potenziale per applicazioni alimentari, nutraceutiche e cosmetiche.

## Dal laboratorio allo scale-up industriale

Nell'ambito del progetto EcoeFISHent sono stati progettati e realizzati impianti pilota su scala estesa, attualmente in una fase avanzata di ottimizzazione, in grado di integrare tutte le fasi del processo di valorizzazione delle biomasse ittiche sottoutilizzate. Questi impianti rappresentano un passaggio cruciale nel percorso di trasferimento tecnologico, consentendo la validazione dei processi sviluppati in laboratorio in condizioni operative prossime a quelle industriali. L'ultima fase del progetto sarà dedicata alla piena operatività delle linee pilota e alla produzione di prototipi su scala pre-industriale, destinati alla valutazione tecnica, economica e applicativa nei diversi settori target.

Sebbene la presenza di alcune barriere regolatorie possa rallentare, nel breve termine, l'immissione sul mercato dei prodotti sviluppati, il livello di maturità tecnologica raggiunto (TRL elevato) e i risultati ottenuti in termini di qualità, sicurezza e sostenibilità indicano un significativo potenziale di sfruttamento industriale. Le soluzioni sviluppate nell'ambito di EcoeFISHent si configurano come tecnologie scalabili e replicabili, adattabili a differenti contesti produttivi e specie ittiche.

Nel suo complesso, EcoeFISHent dimostra come un'azione coordinata tra ricerca, industria e politiche europee possa trasformare i sottoprodotti ittici in risorse strategiche ad alto valore aggiunto, in linea con l'Agenda ONU 2030 e i principi della *blue circular economy*.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] FAO, Global Facts and Figures on Food Loss and Waste, 2023.
- [2] UNEP, Food Waste Index Report 2024: Think Eat Save, Tracking Progress to Halve Global Food Waste, 2024.
- [3] FAO, Fish and Other Aquatic Products: Market Trends and Outlook, Food Outlook - Biannual Report on Global Food Markets, 2025.
- [4] R.E. Olsen, L. Peñarubia, K. Kousoulaki, *Waste Management Bulletin*, 2024, **2**, 84.
- [5] A. Nawaz, E. Li *et al.*, *Trends Food Sci. Technol.*, 2020, **99**, 34.
- [6] FAO, The State of World Fisheries and Aquaculture, 2020.
- [7] M. Jenssen, J. Matic *et al.*, *Front. Mar. Sci.*, 2025, **12**, 1572015.
- [8] S. Advaita, K.V. Sunooj *et al.*, *Sustainable Food Technol.*, 2025.
- [9] A. Honrado, P. Ardila *et al.*, *Foods*, 2023, **12**, 4437.
- [10] M. Romano, M. Romano, WO2015181769A1, 2015.
- [11] F. Grasso, D. Méndez-Paz *et al.*, *Gels*, 2023, **9**, 760.
- [12] F. Grasso, D. Méndez Paz *et al.*, *Gels*, 2024, **10**, 246.
- [13] F. Grasso, M.M. Alonso Martínez *et al.*, *Antioxidants*, 2024, **13**, 1011.
- [14] M. Jenssen, I. Sone *et al.*, *Front. Nutr.*, 2025, **12**, 1663294.
- [15] L. Dondero, G. De Negri Atanasio, *et al.*, *Mar. Biotechnol.*, 2025, **27**, 63.

## The Hidden Value of Zero-Waste Fish

Every year, the fishing and aquaculture industry generates tons of by-products - heads, fins, bones, skin, and trimmings - often discarded or underused, with significant economic and environmental consequences. But what if these undifferentiated biomasses could be transformed into valuable ingredients for nutraceuticals, cosmetics, and even sustainable packaging? Research shows that this vision is possible.



# TESTING LABORATORY MASTER

## LABORATORI DI PROVA CHIMICI E MICROBIOLOGICI

### DIVENTA IL PROFESSIONISTA CHE TUTTI I LABORATORI CERCANO

Master per laureati e professionisti che vogliono distinguersi nei laboratori accreditati e valorizzare le proprie competenze



## Stage garantito di 4 mesi!

15 Aprile - 2 Luglio 2026

Iscrizioni aperte fino al 31 marzo 2026

324 ore di lezioni e workshop suddivise in 6 moduli formativi per 24 unità didattiche



[www.testinglaboratorymaster.com](http://www.testinglaboratorymaster.com)

patrocinio di







# LCxLC NELLA CHIMICA DEGLI ALIMENTI

**La cromatografia liquida multidimensionale (MD-LC) rappresenta uno strumento avanzato per lo studio delle matrici alimentari complesse, grazie alla possibilità di combinare separazioni complementari e aumentare significativamente parametri come risoluzione, selettività e capacità di identificazione. Questo approccio consente di ottenere profili chimici più dettagliati, affidabili e informativi.**

Le nuove sfide nel campo alimentare e la necessità di monitorarne qualità, autenticità e sicurezza hanno spinto la comunità scientifica all'impiego di tecniche analitiche sempre più avanzate. Tra queste, la cromatografia liquida multidimensionale, in particolare nella modalità “comprehensive” (LCxLC) rappresenta oggi una delle soluzioni più complete e versatili [1]. Grazie alla possibilità di combinare metodi di separazione complementari, la tecnica consente di aumentare in modo significativo la capacità separativa, migliorando selettività e risoluzione rispetto alle convenzionali analisi monodimensionali. Ciò risulta particolarmente utile nelle matrici complesse di origine alimentare, spesso caratterizzate da migliaia di metaboliti con proprietà chimico-fisiche simili.

In LCxLC, l'intero eluato dalla prima dimensione (1D) cromatografica viene trasferito, mediante un'interfaccia di modulazione costituita da una o più valvole multiporte, ad una seconda dimensione (2D) dotata di meccanismi di separazione differenti [2].

La potenzialità della LCxLC risiede nell'incremento della risoluzione cromatografica, grazie alla distribuzione dei composti su di uno spazio bi-dimensionale, permettendo di ridurre le co-eluzioni e, nel caso in cui la tecnica è accoppiata alla spettrometria di massa (MS), fenomeni di soppressione ionica.

Numerosi studi hanno dimostrato come l'applicazione di questa tecnica permetta di ottenere una caratterizzazione molto più completa di composti fenolici presenti in frutta, vino, ed estratti vegetali, facilitando l'identificazione di costituenti minoritari che molto spesso sfuggono con le tecniche convenzionali. Nel caso dei pistacchi, ad esempio, l'approccio LCxLC

ha permesso di ottenere mappe bi-dimensionali altamente informative, utili a distinguere *cultivar* e origini geografiche diverse, nonché per valutare marker di autenticità (Fig. 1) [3].

Oltre ai composti fenolici, la LCxLC ha trovato applicazioni rilevanti anche nello studio delle classi lipidiche. In particolare, l'accoppiamento LCxLC-MS/MS ha permesso di espandere il numero di specie lipidiche rilevabili in oli vegetali, frutta secca, semi oleaginosi e prodotti ittici, contribuendo alla valutazione nutrizionale e alla tracciabilità delle filiere agroalimentari. La maggiore risoluzione ottenuta ha consentito la “clusterizzazione” dei lipidi sia per classe che per specie [4].

Un'altra applicazione dove la tecnica si è dimostrata altrettanto cruciale è quella relativa alla caratterizzazione di peptidi bioattivi derivati da prodotti alimentari, dove la presenza di numerosi composti isobarici e

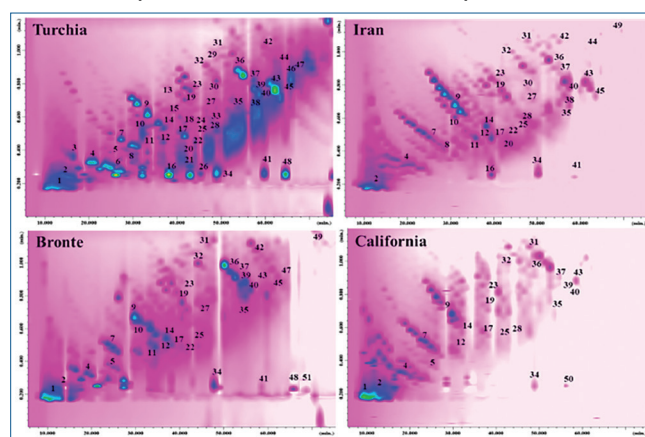


Fig. 1 - Mappe bi-dimensionali di campioni di pistacchio di diversa provenienza geografica





isomerici rende complessa la separazione in LC monodimensionale. L'integrazione con la spettrometria di massa ad alta risoluzione (HRMS) ha ulteriormente potenziato le capacità analitiche, rendendo la LCxLC uno strumento chiave nei moderni *workflow* di proteomica e peptidomica alimentare [5].

L'adozione crescente di software dedicati per la visualizzazione dei cromatogrammi bidimensionali e per la rilevazione automatizzata dei picchi ha rivoluzionato l'elaborazione dei dati LCxLC, rendendo la tecnica notevolmente più intuitiva e accessibile rispetto al passato. I moderni strumenti di "*data analysis*" consentono non solo la ricostruzione accurata del picco cromatografico 2D, ma anche la correzione automatica di effetti indesiderati quali il "*wrap-around*", che si verifica quando il tempo di analisi della seconda dimensione eccede il tempo di modulazione.

Grazie all'integrazione con piattaforme di analisi multivariata (PCA, PLS-DA, OPLS), software di "*data analysis*" favoriscono l'identificazione di marker discriminanti utili per autenticità, tracciabilità geografica, identificazione varietale e valutazioni nutraceutiche. La possibilità di lavorare in modo semi-automatico sulla comparazione dei *fingerprint* bidimensionali riduce i tempi dell'analisi e minimizza la variabilità operatore-dipendente, consentendo l'utilizzo della LCxLC anche a laboratori che non dispongono di competenze altamente specialistiche.

Le prospettive future aprono le porte all'intelligenza artificiale e alle analisi predittive, come i modelli QSRR (Quantitative Structure-Retention Relationships), che permettono di prevedere o individuare i tempi di ritenzione di analiti nelle due dimensioni cromatografiche a partire dalle loro proprietà molecolari. Questi modelli, basati su descrittori chimico-fisici e algoritmi statistici avanzati, aiutano a interpretare in modo più robusto le mappe bidimensionali, a confermare l'identità di composti incogniti e a costruire librerie predittive utili nel *workflow* di "*foodomics non-targeted*". L'evoluzione di questi aspetti digitali, unitamente alla disponibilità di database sempre più ricchi e specifici per composti bioattivi, contribuirà a trasformare la LCxLC in una tecnica *user-friendly*, potenziando il suo impiego in varie branche delle tecniche "*omics*", assicurando qualità e sicurezza alimentare.

Un ulteriore elemento innovativo nel filone della "*green analytical chemistry*" riguarda la progressiva sostituzione dei solventi organici più impattanti, come l'acetonitrile, con alternative maggiormente sosteni-

bili. Tra queste, il dimetilcarbonato (DMC), il propilen-carbonato (PC) e solventi bio rappresentano una delle soluzioni più promettenti grazie alla bassa tossicità, biodegradabilità e maggiore sostenibilità ambientale. In particolare, il DMC è classificato come "*green solvent*" secondo i criteri della EPA e offre un profilo di sicurezza nettamente migliore rispetto ai solventi convenzionali, oltre a essere ottenibile mediante processi fermentativi o reazioni catalitiche da biomasse o scarti alimentari, migliorandone ulteriormente la sostenibilità. Recenti studi hanno dimostrato come il DMC possa essere impiegato efficacemente come fase mobile o co-solvente in cromatografia liquida ad alte prestazioni, mantenendo buone proprietà eluotriche e compatibilità con rivelatori MS [6]. Questa sostituzione, applicata anche a metodi miniaturizzati LCxLC, potrebbe consentire di ridurre l'impatto ambientale delle analisi senza comprometterne il potere risolutivo, rappresentando un'evoluzione concreta verso protocolli più responsabili, sicuri e in linea con i principi della chimica verde.

La cromatografia liquida multidimensionale "*comprehensive*" si presenta, dunque, come una tecnica chiave per affrontare le sfide analitiche più ardue in vari settori, incluso quello alimentare, unendo rigore scientifico e capacità di innovazione.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] L. Mondello *et al.*, *Nat. Rev. Methods Primers*, 2023, **3**, 86.
- [2] K. Arena *et al.*, *J. Chromatogr. Open*, 2025, **7**, 100222.
- [3] K. Arena *et al.*, *Anal. Bioanal. Chem.*, 2019, **11**, 4819.
- [4] P. Donato *et al.*, *Anal. Bioanal. Chem.*, 2018, **410**, 3297.
- [5] Y. Guo *et al.*, *Anal. Sci. Adv.*, 2023, **4**, 181.
- [6] O. Kalisz *et al.*, *Green Chem.*, 2025, **27**, 3020.

### Multidimensional Liquid Chromatography

Comprehensive multidimensional liquid chromatography represents an advanced tool for studying complex food matrices, thanks to the combination of complementary separations and the significant increase in parameters such as resolution, selectivity, and identification capability. This approach enables the generation of more detailed, reliable, and informative chemical profiles.



LA SOLUZIONE COMPLETA

# Analisi del packaging alimentare

Conformità, performance e sicurezza per ogni genere di imballaggio



## Shelf life e prestazioni barriera

Test di permeabilità a ossigeno, umidità e gas  
OTR&WVTR  
Headspace  
Invecchiamento accelerato



## Strumentazione per test fisici e meccanici

Estensibilità  
Tenuta  
Resistenza all'impatto



## Strumentazione per analisi di MOCA

Test di migrazione globale e specifica secondo Reg. UE 10/2011







# LA SPETTROMETRIA DI MASSA NELL'ANALISI DEGLI ALLERGENI "NASCOSTI" NEGLI ALIMENTI

***Gli allergeni alimentari "nascosti", dovuti a contaminazioni accidentali, rappresentano un problema di salute pubblica. L'articolo descrive come la spettrometria di massa possa contribuire ad affrontarlo grazie alla sua selettività e alla capacità di rilevare simultaneamente più allergeni, evidenziandone il ruolo complementare rispetto ai test immunoenzimatici usati nel controllo ufficiale.***

**N**egli ultimi anni il tema degli allergeni alimentari ha acquisito un'importanza crescente nell'opinione pubblica riconducibile alla forte risonanza mediatica di alcuni casi di cronaca con esiti fatali. Con il Regolamento (UE) n. 1169/2011 [1], l'Unione Europea ha individuato 14 allergeni che i produttori devono chiaramente indicare in etichetta quando utilizzati come ingredienti. L'elenco comprende: cereali contenenti glutine, crostacei, uova, pesce, arachidi, soia, latte, frutta a guscio (mandorle, noccioline, noci, anacardi, noci pecan, noci brasiliane, pistacchi, noci macadamia o del Queensland), sedano, senape, semi di sesamo, lupini, molluschi e solfiti. Ad eccezione dei solfiti, tutti gli allergeni in elenco sono molecole di natura proteica. Accanto a quelli intenzionalmente aggiunti (ingredienti), più subdola è la presenza involontaria di allergeni "nascosti", dovuta a fenomeni di cross-contaminazione accidentale lungo la filiera produttiva, presenza che può determinare gravi rischi per la popolazione allergica. Per mitigare tale rischio, vengono apposte le cosiddette *Precautionary Allergen Labelling* (PAL), con diciture del tipo "può contenere...". Tuttavia, l'uso esteso e non sempre giustificato delle PAL ha generato una progressiva "assuefazione" dei consumatori, che spesso tendono a ignorarle. Per superare questo approccio cautelativo indiscriminato, da tempo si auspica l'introduzione di limiti massimi per la cross-contaminazione, basati

sul concetto di *Reference Dose* che rappresenta una stima della quantità di allergene (in mg di proteine) in grado di provocare una reazione allergica oggettiva in una certa percentuale (tipicamente il 5%) degli individui allergici a quello specifico alimento [2]. In questo contesto, l'*Allergen Bureau*, autorevole organizzazione australiana a supporto dell'industria alimentare, ha definito su basi scientifiche le *Reference Doses* per numerosi allergeni, con l'obiettivo di promuovere un uso delle PAL fondato sull'analisi del rischio piuttosto che su un approccio puramente precauzionale (<https://vital.allergenbureau.net/>). 

I saggi immunoenzimatici ELISA (*Enzyme-Linked Immunosorbent Assay*), commercializzati fin dagli anni Novanta rappresentano tuttora la tecnica analitica maggiormente impiegata dai laboratori di controllo ufficiale come quelli degli Istituti Zooprofilattici Sperimentali. La loro grande diffusione è dovuta alla semplicità di esecuzione, alla rapidità di risposta e ai costi contenuti. Questi test sono prevalentemente utilizzati a scopo qualitativo (rilevato/non rilevato) e sul mercato sono disponibili kit sviluppati da diversi produttori per un'ampia gamma di allergeni (<https://doi.org/10.46756/sci.fsa.no660>). Tuttavia, negli alimenti sottoposti a trasformazioni tecnologiche (processi termici, meccanici o biochimici) le proteine allergeniche vanno incontro a fenomeni di denaturazione, frammenta- 



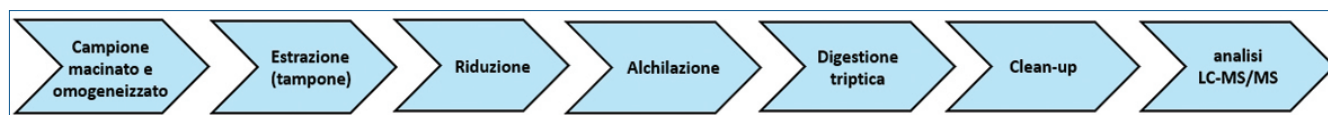


Fig. 1 - Tipico schema di preparazione del campione per l'analisi degli allergeni con l'approccio *bottom-up*. In alcuni metodi, lo step di clean-up è effettuato prima della digestione triptica

zione o modificazione chimica che ne alterano la struttura primaria, secondaria e terziaria. Tali modifiche possono compromettere il riconoscimento immunologico che si fonda sull'interazione tra epitopo e anticorpo. L'epitopo è quella porzione dell'antigene (proteina) in grado di legarsi allo specifico anticorpo utilizzato in un certo kit ELISA. La perdita dell'accessibilità all'epitopo target o la sua alterazione conformazionale può quindi determinare una ridotta reattività del sistema immunoenzimatico, con la possibilità di risultati falsi negativi. In misura più limitata, nell'ambito del controllo ufficiale vengono anche applicate tecniche biomolecolari basate sulla reazione a catena della polimerasi (PCR). Questi approcci consentono l'identificazione dell'allergene attraverso la rilevazione del DNA, senza una determinazione diretta delle proteine allergeniche. Di conseguenza, l'impiego della PCR dovrebbe essere confinato ad una valutazione preliminare [3].

A partire dall'inizio dello scorso decennio, vengono pubblicati i primi studi che si avvalgono della cromatografia liquida accoppiata alla spettrometria di massa tandem (LC-MS/MS) per la determinazione di allergeni in traccia negli alimenti, adottando il cosiddetto approccio *bottom-up*. Con questa strategia, viene misurata la proteina allergenica attraverso uno o più dei suoi peptidi marker generati mediante una digestione enzimatica [4]. L'analisi diretta delle proteine integre (approccio *top-down*) risulta, infatti, molto più complessa e con una sensibilità analitica non idonea alla valutazione delle cross-contaminazioni che richiede la possibilità di rilevare concentrazioni nell'ordine di poche parti per milione (mg di proteine allergeniche/kg). Prima dell'analisi strumentale, la preparazione del campione secondo l'approccio *bottom-up* prevede una sequenza articolata di fasi operative schematizzate in Fig. 1.

La digestione enzimatica delle proteine allergeniche è preceduta da una fase di riduzione, finalizzata alla rottura dei ponti disolfuro, seguita da

un'alchilazione che ne impedisce la riformazione. Questo trattamento consente di stabilizzare la struttura proteica e aumentare l'accessibilità ai siti di taglio dell'enzima, generalmente la tripsina, migliorando l'efficienza e la riproducibilità della digestione. Ai fini della rilevazione mediante spettrometria di massa, la selezione dei peptidi marker rappresenta una fase critica e richiede un approccio strutturato che integra valutazioni bioinformatiche, requisiti molecolari e verifiche sperimentali [4]. A partire dalle sequenze delle proteine allergeniche, viene effettuata una digestione triptica *in silico* per generare un insieme di peptidi candidati. Questi vengono quindi filtrati in base a criteri di proteotipicità (unicità rispetto ad altre specie e ingredienti), lunghezza appropriata, assenza di siti suscettibili a modificazioni chimiche e idoneità all'analisi LC-MS/MS in termini di ionizzazione e frammentazione. I peptidi selezionati sono successivamente validati sperimentalmente mediante l'analisi di estratti nella matrice reale, al fine di confermarne l'effettiva rilevabilità, la stabilità lungo il processo analitico e l'assenza di interferenze cromatografiche o isobariche. Le principali fasi dell'analisi bioinformatica sono schematizzate in Fig. 2. Per allergeni ampiamente studiati, quali latte e uova, la gamma dei peptidi marker è consolidata, semplificando la fase di selezione; tuttavia, tale processo non può essere completamente omesso, poiché la risposta strumentale dipende da molteplici fattori, tra cui la piattaforma analitica in uso e la matrice alimentare di interesse. L'approccio *bottom-up* consente di prescindere dalla struttura tridimensionale nativa della proteina, rendendo possibile la rilevazione dell'allergene anche in condizioni di marcata denaturazione o degradazione e superando così uno dei principali limiti dei metodi ELISA basati sul riconoscimento epitopico.

Nei metodi LC-MS/MS sviluppati per la determinazione di contaminanti (pesticidi, micotossine, farmaci veterinari etc.) in tracce negli alimenti l'elemento cardine della selettività analitica è rappre-

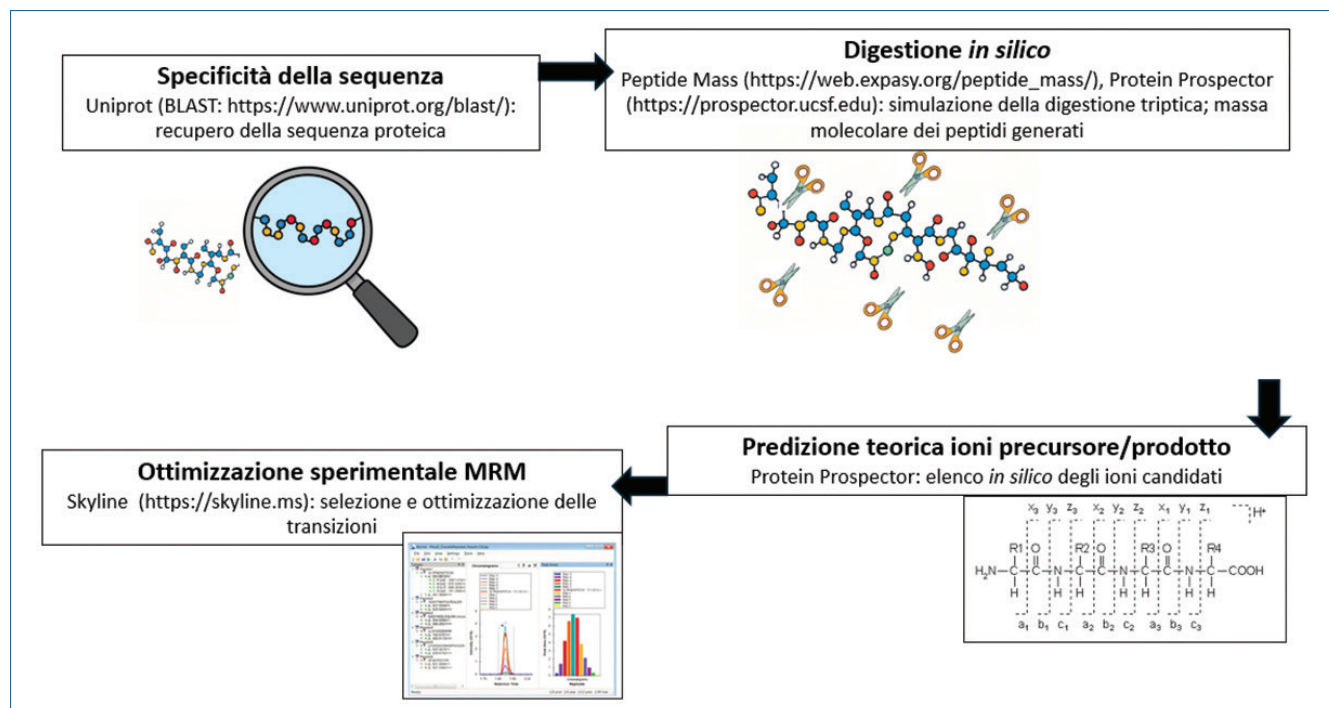


Fig. 2 - Software utilizzati nell'analisi bio-informatica per la scelta dei peptidi marker durante lo sviluppo di un metodo LC-MS/MS per allergeni

sentato da criteri di identificazione ampiamente condivisi a livello internazionale [5]. In particolare, nel caso dei rivelatori triplo quadrupolo, l'identificazione di un analita è considerata valida quando lo standard di riferimento e la molecola rilevata nel campione soddisfano 3 condizioni:

- almeno due transizioni diagnostiche in comune;
- stesso rapporto ionico tra le transizioni monitorate;
- stesso tempo di ritenzione cromatografico, ovvero entro una tolleranza compatibile con l'errore sperimentale.

Nel contesto dell'analisi degli allergeni, tali criteri di identificazione sono rafforzati dalla possibilità di monitorare simultaneamente per uno stesso allergene, più proteine caratteristiche e, per ciascuna di esse, più peptidi marker. Ad esempio, nel caso del latte, la selettività può essere incrementata sia monitorando simultaneamente peptidi marker di proteine differenti ( $\beta$ -lattoglobulina e  $\alpha$ -caseina), sia selezionando per ciascuna proteina più peptidi proteotipici, ciascuno verificato mediante i criteri di identificazione sopra riportati. Un altro vantaggio della tecnica LC-MS/MS è dato dalla possibilità di effettuare determinazioni multi-allergene, consentendo anche la quantificazione simultanea di

più allergeni in un'unica analisi. Tale caratteristica risulta particolarmente interessante nel controllo delle contaminazioni di produzioni complesse, tipiche dell'industria alimentare moderna. In letteratura sono riportate procedure in grado di determinare contemporaneamente fino a dieci allergeni in varie matrici alimentari, mentre con l'applicazione di tecniche ELISA sarebbe necessario l'impiego di un kit specifico per ciascuna proteina che si intende rilevare.

Ciò fin qui discusso riguarda gli aspetti analitici qualitativi; per quanto concerne, invece, la determinazione quantitativa, l'accuratezza dei metodi in LC-MS/MS rappresenta ad oggi un punto critico soprattutto per gli alimenti più complessi come i prodotti da forno, i dolci o i sughi pronti [6]. Va sottolineato che le prestazioni quantitative dei metodi per l'analisi degli allergeni assumerebbero un ruolo cruciale nel caso in cui il legislatore decidesse di fissare dei livelli massimi basati sulle *Reference Doses*. La difficoltà di un'analisi quantitativa risiede nel fatto che il misurando è la "massa totale di proteine allergeniche per massa di alimento", mentre l'entità effettivamente misurata è un peptide marker derivante dalla digestione enzimatica.

Sebbene proteina e peptidi siano in un rapporto molare 1:1, le fasi di preparazione del campione, in particolare la digestione triptica, possono avvenire con rese differenti nello standard e nel campione incognito, introducendo errori sistematici non controllabili. A questo si aggiunge l'impossibilità di applicare routinariamente una quantifica mediante diluizione isotopica, poiché la sintesi dello standard interno corrispondente al misurando, ovvero la proteina allergenica isotopicamente marcata, è molto impegnativa, tanto che in letteratura si trovano solo pochissimi esempi [6]. Nella maggior parte degli studi, quindi, vengono impiegati i peptidi marker marcati isotopicamente, che, pur essendo commercialmente disponibili, non sono in grado di compensare molti degli errori sistematici insiti nel procedimento analitico in quanto mimano in modo molto parziale il comportamento della proteina nativa. Alcuni ricercatori hanno esplorato l'impiego di standard interni marcati di tipo, per così dire "intermedio", quali i concatamers (QconCAT) e i peptidi marcati a catena lunga (*long-chain peptides*), concepiti per mimare la fase di digestione enzimatica [4]. Tuttavia, neanche queste molecole hanno dimostrato di poter migliorare significativamente l'accuratezza. In Fig. 3 sono schematizzati i tre tipi di standard interni qui discussi.

Anche per via di queste criticità, la disponibilità commerciale di materiali di riferimento in matrice (con valori di riferimento certificati o almeno "validati") è scarsa e, sebbene si organizzino annualmente numerosi circuiti interlaboratorio, questi sono orientati alla valutazione qualitativa delle prestazioni analitiche, risultando principalmente concepiti per i test ELISA. L'esame della letteratura mette in evidenza una notevole eterogeneità dei disegni sperimentali degli studi di validazione finalizzati alla stima delle prestazioni dei metodi. A ciò si affianca una varietà degli approcci alla taratura, che includono curve in matrice con l'aggiunta dei materiali di riferimento in differenti fasi della preparazione del campione, con o senza l'impiego di standard interni marcati, fino all'applicazione del metodo delle aggiunte standard [4, 6]. Non c'è neanche un consenso su quale sia il materiale di riferimento (standard) più adeguato: l'allergene o, piuttosto, i peptidi marker sintetici. Tutto ciò rende estremamente complesso il confronto tra le pre-

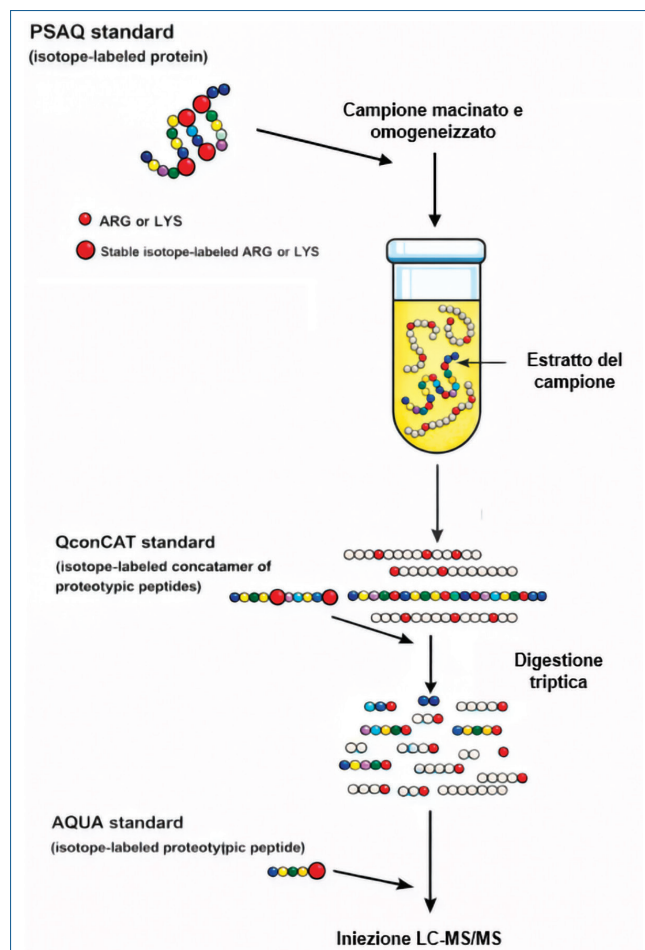


Fig. 3 - Struttura semplificata dei tre tipi di standard interni marcati discussi nel testo. PSAQ: Protein Standard Absolute Quantification; QconCAT: Quantitative ConCATemers; AQUA: Absolute QUantification. Modificata da [4] sotto i termini della licenza Creative Commons Attribution (CC BY)

stazioni delle procedure pubblicate. Nella quasi totale assenza di materiali di riferimento in matrice e di circuiti interlaboratorio, non è possibile effettuare un controllo di qualità esterno che permetterebbe di valutare l'esattezza dei metodi. La situazione potrebbe migliorare con l'emanazione di linee guida internazionalmente riconosciute, analogamente a quanto avvenuto, ad esempio, nel settore dell'analisi delle proteine in ambito clinico [7]. In questo modo si armonizzerebbero gli studi di validazione favorendo quantomeno la comparabilità dei metodi sviluppati dai diversi laboratori, pur nella consapevolezza che, per quanto detto, le prestazioni analitiche non possano eguagliare quelle tipiche delle procedure quantitative sviluppate per le "piccole molecole".





In conclusione, i saggi immunoenzimatici (ELISA) sono uno strumento insostituibile nel controllo ufficiale degli allergeni alimentari, consentendo l'analisi di un elevato numero di campioni in tempi rapidi. In questo contesto, anche per i suoi costi, la spettrometria di massa si configura come tecnica complementare, fondata sul riconoscimento molecolare dei peptidi e pertanto intrinsecamente più selettiva, in grado di fornire una conferma definitiva nei casi di campioni risultati positivi ai test immunoenzimatici o biomolecolari. Ulteriori progressi possono essere compiuti per migliorare l'accuratezza della determinazione quantitativa e ampliare la gamma degli allergeni analizzabili mediante metodi LC-MS/MS.

#### BIBLIOGRAFIA

- [1] Regolamento (UE) n. 1169/2011, *Gazzetta Ufficiale dell'Unione Europea*, 2011, L 304, 18.
- [2] T. Holzhauser, P. Johnson *et al.*, *Food and Chemistry Toxicology*, 2020, **145**, 111709.
- [3] G. O'Connor, F. Ulberth, European Commission - JRC Technical Reports, 2017, JRC108259.
- [4] M. Planque, T. Arnould *et al.*, *Food Allergen Analysis: Detection, Quantification and Validation by Mass Spectrometry*, IntechOpen, 2017, DOI: **10.5772/intechopen.69361**
- [5] H. Cantwell (Ed.) Eurachem Guide, The Fitness for Purpose of Analytical Methods - A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics, H. Cantwell (Ed.) Eurachem Guide 3<sup>rd</sup> Ed., Eurachem, 2025.
- [6] L. Murru, D. Giusepponi *et al.*, *Microchemical Journal*, 2026, 220, 116574.
- [7] Clinical and Laboratory Standards Institute (CLSI), Quantitative Measurement of Proteins and Peptides by Mass Spectrometry, CLSI document C64, 2019.

#### Mass-Spectrometry for the Analysis of "Hidden" Food Allergens

"Hidden" food allergens resulting from accidental cross-contamination pose a major public health challenge. This article illustrates how mass spectrometry can address this issue through its high selectivity and ability to detect multiple allergens simultaneously, highlighting its complementary role to immunoenzymatic tests used in official control.



Organo Ufficiale della Società Chimica Italiana

Da più di cento anni  
la rivista per chi si occupa  
di **Chimica in Italia**

Scarica la app gratuita per leggere  
La Chimica e l'Industria  
sui tuoi dispositivi elettronici





# COMPOSTI VOLATILI E SCIENZE SENSORIALI PER LA DEFINIZIONE DELLA QUALITÀ DEGLI ALIMENTI

*Studi di volatomica in associazione alle scienze sensoriali rappresentano un approccio valido per la valutazione della qualità degli alimenti, consentendo di ottimizzarne fattori pre- e postharvest, processi di trasformazione e parametri di conservazione anche per lo sviluppo dei novel food.*



L'avvento delle scienze omiche (genomica, trascrittomica, proteomica, metabolomica), dopo il Progetto Genoma Umano (HGP), ha rivoluzionato lo studio dei sistemi biologici, consentendone un'analisi olistica ed integrata [1]. Tra queste discipline, la volatilmica, ramo specializzato della metabolomica, studia i composti organici volatili (VOCs), molecole a basso peso molecolare caratterizzate da un'elevata pressione di vapore a temperatura ambiente, responsabili delle caratteristiche sensoriali degli alimenti [2].

Negli ultimi decenni, numerosi studi hanno dimostrato che lo studio del profilo VOCs di un alimento può dare importanti informazioni sulla qualità, autenticità e sicurezza degli alimenti [3].

I VOCs appartengono a diverse classi chimiche, come aldeidi, chetoni, alcoli, esteri e terpeni,

ognuna con caratteristiche chimico-fisiche ben distinte. La loro presenza e concentrazione in un alimento varia a seconda dello stato dell'alimento stesso (es. fresco), da eventuali processi di trasformazione (es. fermentazione, essiccazione, tostatura) e conservazione (temperatura, packaging) [4]. Altri fattori che incidono sul profilo volatile in un alimento sono i fattori biologici (es. genetica, stadio di maturazione) e i fattori ambientali (es. origine geografica, metodi di coltivazione, stress biotici ed abiotici) [2, 5, 6].

Questi fattori influenzano notevolmente l'aroma dell'alimento, determinando profili volatili unici che costituiscono vere e proprie impronte chimiche digitali, utili per verificarne la qualità, l'autenticità e la sicurezza alimentare.

L'analisi dei VOCs richiede tecniche in grado di estrarre, separare ed identificare numerose molecole presenti in matrici complesse, come quelle alimentari. In questo contesto, la micro-estrazione in fase solida da spazio di testa (HS-SPME) accoppiata alla gas cromatografia-spettrometria di massa (GC-MS) rappresenta la tecnica più utilizzata [7]. La SPME è una tecnica analitica miniaturizzata che combina in un unico step l'estrazione, la purificazione e la pre-concentrazione degli analiti volatili da campioni liquidi o solidi, riducendo o eliminando l'uso di solventi, garantendo rapidità, riproducibilità e sostenibilità [2]. L'analisi HS-SP-

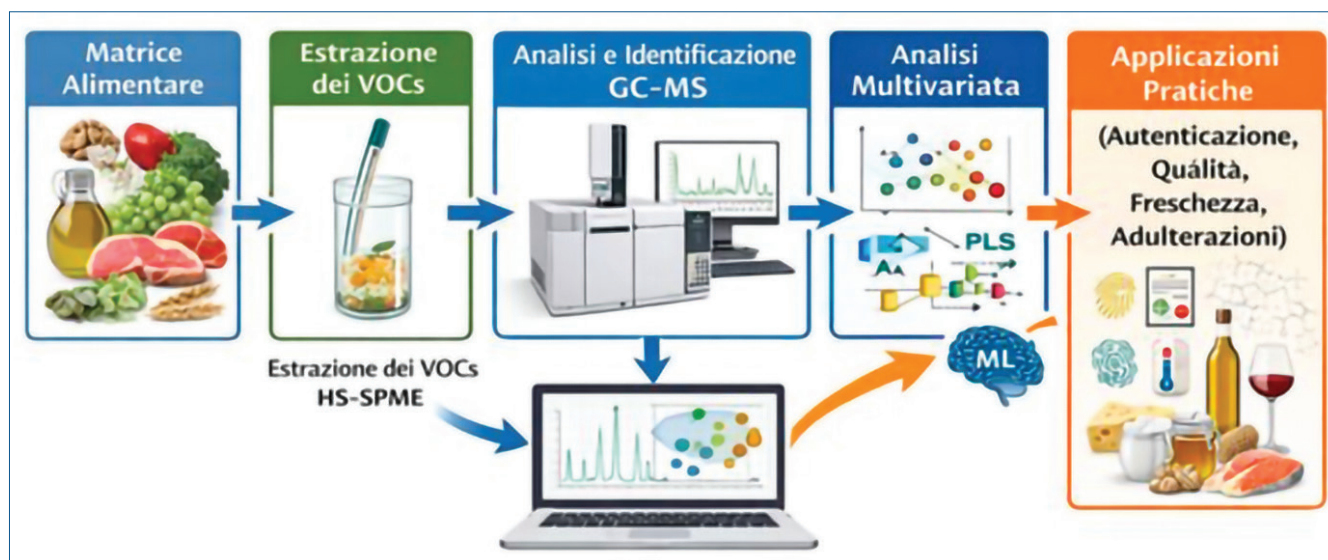


Fig. 1 - Workflow dell'analisi dei composti organici volatili (VOCs) negli alimenti. Il diagramma mostra le principali fasi dell'analisi volatilomica: campionamento, estrazione mediante micro-estrazione in fase solida da spazio di testa (HS-SPME), analisi tramite GC-MS o tecniche alternative (GCxGC-MS), raccolta dei dati e successiva elaborazione tramite analisi statistica multivariata per identificare potenziali biomarcatori volatili e valutare qualità, autenticità e freschezza dei prodotti alimentari

ME/GC-MS permette di ottenere profili volatili da matrici tal quali, senza nessun step preliminare di purificazione od estrazione. Pertanto, i profili ottenuti sono altamente rappresentativi del campione che si sta analizzando [8].

I dati generati mediante HS-SPME/GC-MS necessitano di elaborazione mediante analisi statistiche multivariate, fondamentali per ridurre la complessità dei dataset, discriminare i campioni in esame e individuare potenziali biomarcatori volatili di qualità [9] (Fig. 1).

Il profilo VOCs trova applicazione concreta lungo l'intera filiera alimentare, dalla produzione alla distribuzione, contribuendo in modo diretto alla definizione della qualità dei prodotti. Nel settore ortofrutticolo, la volatilomica è utilizzata per monitorare la freschezza, lo stadio di maturazione e la conservazione dei prodotti. Ad esempio, nei frutti climaterici, ovvero quelli che continuano a maturare dopo la raccolta, come mele e banane, la variazione di esteri e alcoli volatili riflette i cambiamenti metabolici associati alla maturazione completa e permette di ottimizzare le condizioni di raccolta e conservazione, migliorando la qualità percepita dal consumatore [5].

Un ambito di crescente interesse è rappresentato dai prodotti di IV gamma, ovvero frutta e verdura fresca, lavata, tagliata e confezionata e per esse-

re pronta al consumo. Questi prodotti rispondono alle esigenze di praticità del consumatore moderno, ma presentano criticità legate ai processi di taglio e confezionamento, che possono alterarne la qualità attraverso fenomeni di ossidazione, stress tissutale e attività microbica. Tali modifiche influenzano il profilo VOCs che, quindi, viene utilizzato per monitorare la *shelf-life*, ma anche la salubrità e la sicurezza dell'alimento [10].

Nei prodotti fermentati, come vino, birra e latticini, i VOCs rappresentano dei marcatori fondamentali dei processi tecnologici subiti dal prodotto, risultando, ad esempio, fortemente influenzati dal tipo di colture starter impiegate [2].

Nel vino, inoltre, l'impronta aromatica consente di differenziare varietà, aree di produzione e tecniche di vinificazione [11]. Nella birra, l'analisi dei profili volatili permette di monitorare l'andamento della fermentazione e di individuare precocemente deviazioni indesiderate responsabili della formazione di *off-flavours* [12]. Nei formaggi, invece, specifiche classi di VOCs, in particolare i chetoni, risultano strettamente correlate ai processi di maturazione dell'alimento e possono essere utilizzate come indicatori del grado di stagionatura e della qualità sensoriale del prodotto finale [13].

Nel comparto ittico e delle carni, l'analisi dei VOCs viene con successo applicata per il controllo della





Fig. 2 - Applicazioni della volatilomica negli alimenti: dall'analisi della stagionatura dei formaggi alla verifica dell'origine dell'olio, fino al controllo di freschezza di frutta, verdura, carne e prodotti ittici

freschezza e della sicurezza. È stato visto, infatti, che l'aumento di ammine e composti solforati è indicativo di degradazione microbica consentendo una valutazione precoce della qualità del prodotto, ancor prima dell'aspetto visivo, utile nella gestione della *shelf-life* [2].

Nel complesso, la volatilomica rappresenta non solo uno strumento analitico, ma un supporto concreto alla valorizzazione della qualità sensoriale, alla tutela del consumatore e alla prevenzione delle frodi alimentari (Fig. 2).

Un ulteriore campo applicativo riguarda lo sviluppo dei *novel foods*, ovvero alimenti o ingredienti "nuovi" rispetto a quelli tradizionalmente usati. Lo scopo dello sviluppo di tali alimenti è quello di offrire nuove opportunità nutrizionali. Al contempo, però, un alimento innovativo richiede una rigorosa valutazione della sicurezza prima della commercializzazione. In questi casi, la caratterizzazione del profilo VOCs, integrata con l'analisi sensoriale, risulta fondamentale per comprendere il profilo aromatico dei nuovi prodotti e valutare l'accettabilità da parte del consumatore. Studi recenti evidenziano, infatti, che la percezione sensoriale rappresenta uno dei principali fattori limitanti o abilitanti per il successo dei *novel foods* sul mercato, rendendo essenziale l'approccio combinato chimico-sensoriale nella loro progettazione e validazione [10].

L'analisi sensoriale degli alimenti si inserisce nel più ampio contesto delle scienze sensoriali che studiano la relazione tra le caratteristiche del pro-

dotto e le preferenze del consumatore utilizzando approcci multidisciplinari di tecnologia degli alimenti, statistica, psicologia, sociologia, chimica e biologia. Le scienze sensoriali, all'interno delle aziende, sono l'anello di collegamento tra le unità di ricerca e sviluppo e quelle di controllo qualità e marketing.

Le scienze sensoriali si strutturano come disciplina accademica negli USA a partire dal 1960 quando l'università californiana di Davis e quella del Massachusetts, in Oregon, danno vita ai primi corsi sul tema e il *British Standard Institute* fonda i primi gruppi di lavoro per elaborare standard che siano di riferimento per la corretta applicazione dell'analisi sensoriale con la formulazione delle prime schede di valutazione e dalle prime valutazioni numeriche. Nel 1975 una divisione specializzata dell'*Institute of Food Technologists* definisce la valutazione sensoriale come: "una disciplina scientifica impiegata per evocare, misurare, analizzare ed interpretare le sensazioni che possono essere percepite dagli organi di senso: vista, udito, olfatto, gusto e tatto".

Lo "strumento" di misura principale che si utilizza in analisi sensoriale è il 'panel test', un gruppo ristretto di persone (8-12 soggetti) (il "panel") selezionate e addestrate dal capo panel per valutare, in modo oggettivo e ripetibile, le caratteristiche sensoriali di un prodotto. Per tale motivo, tale "strumento" è molto sofisticato e richiede una calibrazione costante *ad hoc* per ogni prodotto da analizzare. L'obiettivo del panel è quello di misurare differenze



UNI EN ISO 8586:2023	<b>Analisi sensoriale - Selezione e formazione degli assaggiatori</b> La norma specifica i criteri per la selezione e le procedure per la formazione degli assaggiatori allenati e addestrati per alimenti e bevande, nonché prodotti per la cura della casa e della persona. È applicabile a tutte le industrie interessate alla valutazione dei prodotti da parte degli organi di senso
UNI EN ISO 13299:2016	<b>Analisi sensoriale - Metodologia - Guida generale per la definizione del profilo sensoriale</b> La norma fornisce delle linee guida sul processo globale di sviluppo di un profilo sensoriale. I profili sensoriali possono essere definiti per tutti i prodotti o campioni che possono essere valutati dai sensi della vista, dell'odore, del gusto, del tatto, o dell'udito (per esempio, prodotti alimentari, bevande, prodotti del tabacco, cosmetici, tessili, carta, imballaggi, campioni di aria o d'acqua). La norma può essere utile anche negli studi sulla conoscenza e il comportamento umano
UNI EN ISO 5492:2017	<b>Analisi sensoriale - Vocabolario</b> La norma definisce i termini relativi all'analisi sensoriale
UNI EN ISO 5495:2016	<b>Analisi sensoriale - Metodologia - Metodo di comparazione a coppie</b> La norma descrive una procedura per determinare se esiste una differenza sensoriale percepibile o una somiglianza tra campioni di due prodotti relativamente all'intensità del descrittore sensoriale
UNI EN ISO 4120:2021	<b>Analisi sensoriale - Metodologia - Metodo triangolare</b> La norma specifica una procedura per determinare se esiste una differenza sensoriale percepibile o una somiglianza tra i campioni di due prodotti. Il metodo è una procedura di scelta forzata
UNI EN ISO 8589:2014	<b>Analisi sensoriale - Guida generale per la progettazione di locali di prova</b> La presente norma è la versione ufficiale in lingua inglese della norma europea EN ISO 8589 (edizione febbraio 2010) e dell'aggiornamento A1 (edizione giugno 2014). La norma fornisce una guida generale per la progettazione di locali di prova destinati all'analisi sensoriale dei prodotti
UNI EN ISO 11136:2020	<b>Analisi sensoriale - Metodologia - Guida generale per lo svolgimento di prove edonistiche con i consumatori in uno spazio controllato</b> La norma descrive gli approcci per misurare, in uno spazio controllato, il grado di gradimento dei prodotti da parte dei consumatori

Tab. 1 - Alcuni standard normativi internazionali in materia di analisi sensoriale

oggettive tra prodotti, descriverne il profilo sensoriale e quantificare l'intensità di specifici attributi. Le metodiche di misura del panel sono l'esecuzione di test analitici, sia discriminanti che descrittivi, che richiedono precisione e standardizzazione, come quelli usati, ad esempio, per la classificazione degli oli di oliva vergini ed extravergini. Il Reg. CE n. 2568/91 ha reso obbligatoria l'analisi sensoriale condotta da giudici esperti (panel di assaggiatori esperti) attraverso la quale viene espresso un giudizio sulla qualità dell'olio che ha valore legale ai fini della etichettatura degli oli vergini ed extravergini di oliva, IGP e DOP. Il mancato superamento della prova di analisi sensoriale declassa l'olio da extravergine a vergine.

Gli assaggiatori registrano le sensazioni percepite durante una seduta di assaggio, lavorando in silenzio, in modo rilassato e non frettoloso e prestando la massima attenzione al campione in esame. Il capo panel è il responsabile della selezione, dell'addestramento e del controllo degli assaggiatori, nonché del funzionamento del panel. È il responsabile della ricezione, della codifica, della presentazione dei campioni agli assaggiatori secondo il disegno sperimentale adottato e della loro conservazione mantenendone l'anonimato per tutto il tempo. Ol-

tre a gestire la seduta di assaggio ed elaborare i risultati, la sua missione è motivare i componenti del gruppo, suscitando interesse e curiosità ed evitando di influenzare con la sua opinione.

I campioni vengono valutati attraverso la definizione e la quantificazione di alcuni attributi, definiti descrittori, che devono essere il più possibile oggettivi: selezionare la migliore terminologia è importante per tutte le tecniche di misurazione che usano un descrittore per definire la percezione sotto esame e per i test di classificazione. La definizione degli attributi da valutare deve essere quanto più vicina possibile alle reali proprietà chimiche e fisiche del prodotto in esame. Il descrittore deve essere discriminante (indicare una differenza percepibile tra i campioni), non ridondante e correlato ad un concetto di misura strumentale. Deve essere singolo, compreso in un intervallo definito, preciso e misurabile in riferimento ad uno standard (per esempio: la dolcezza di una soluzione di saccarosio 3 g/l). Infine deve essere comunicabile, ovvero comprensibile ai fruitori.

La definizione dei descrittori è il momento in cui il gruppo panel si riunisce per selezionare le caratteristiche fondamentali del prodotto e ne decide la scala di misura (Tab. 1).

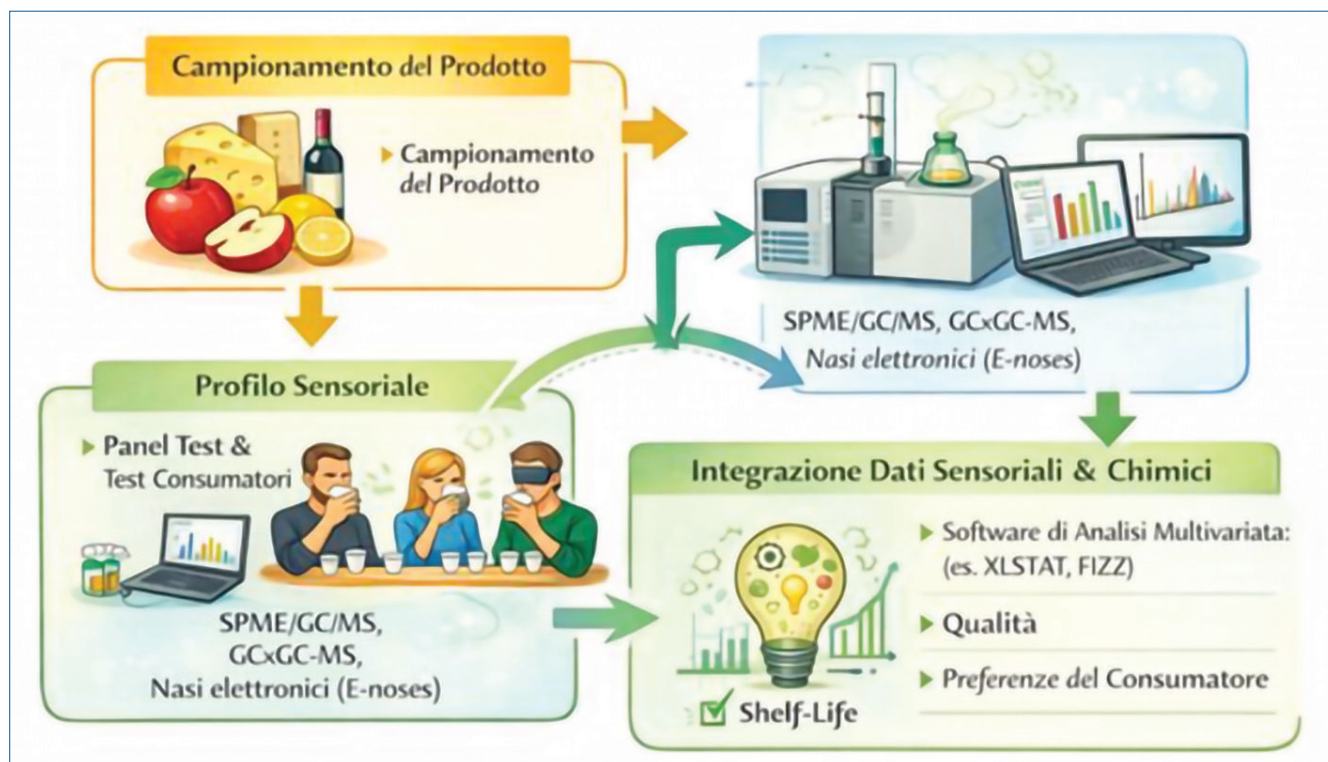


Fig. 3 - Integrazione dell'analisi sensoriale con il profilo chimico dei VOCs per ottimizzare la qualità e il successo di nuovi prodotti alimentari

L'analisi sensoriale, dunque, è un pilastro fondamentale per l'industria alimentare sia per la definizione che per il mantenimento di elevati standard di qualità.

Le norme internazionali assicurano che le analisi sensoriali siano condotte in modo scientifico, replicabile e oggettivo, supportando lo sviluppo, il controllo qualità e il marketing di prodotti alimentari, bevande, cosmetici e altro ancora.

In conclusione, l'analisi dei composti volatili in associazione alle scienze sensoriali rappresenta un approccio molto valido per la caratterizzazione della qualità degli alimenti. Tale metodica permette di comprendere quali composti volatili determinano la qualità di un alimento con la possibilità di ottimizzarne i fattori pre- e postharvest, i processi di trasformazione e i parametri di conservazione anche nello sviluppo di alimenti innovativi (Fig. 3).

## BIBLIOGRAFIA

- [1] R. Goodacre, S. Vaidyanathan *et al.*, *Trends in Biotechnology*, 2004, **22**(5), 245.
- [2] Y. Yang *et al.*, *eFood*, 2025, **6**, 101234.
- [3] J.P. Betancourt-Arango, E.E. Villaroel-Solis *et al.*, *F1000Research*, 2024, **13**, 991.
- [4] J. Baggenstoss *et al.*, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2008, **56**(9), 3345.
- [5] C. Su *et al.*, *Food Research International*, 2023, **164**, 112422.
- [6] S. Marzocchi *et al.*, *Food Chemistry*, 2019, **279**, 303.
- [7] M. Zoccali *et al.*, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2019, **115**, 226.
- [8] F. Huang, S. Gu, *Foods*, 2022, **11**(12), 1925.
- [9] W. Kessler, N. Strehmel *et al.*, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2015, **407**, 7015.
- [10] S. Mosikyan, R. Dolan *et al.*, *Appetite*, 2024, 107655.
- [11] A. Romano *et al.*, *Talanta*, 2016, **154**, 427.
- [12] E. Pittari *et al.*, *Food Chemistry*, 2021, **350**, 129237.
- [13] A.C. Soria, I. Martínez-Castro *et al.*, *Journal of Chromatography A*, 2015, **1420**, 1.

## Volatile Compounds and Sensory Science for the Evaluation of Food Quality

Volatomics studies in association with sensory science represent a valid approach for the evaluation of food quality, allowing to optimize pre- and postharvest factors, food processes and storage parameters also for the development of novel foods.



# Vuoi essere sulla rivista che da più di 100 anni si occupa della **Chimica in Italia?**



## PIANO EDITORIALE 2026

NUMERO	TEMA PRINCIPALE	DISPONIBILE ONLINE
E n. 1/2026 gennaio/febbraio	Chimica e Alimenti	20 febbraio
E n. 2/2026 marzo/aprile	Evoluzione della chimica dei polimeri	22 aprile
E n. 3/2026 maggio/giugno	Avogadro Colloquia	19 giugno
E n. 4/2026 luglio/agosto	MOFs in applicazioni di interesse industriale	4 settembre
E n. 5/2026 settembre/ottobre	La leadership femminile in chimica industriale	21 ottobre
E n. 6/2026 novembre/dicembre	Impiego di peptidi in campo farmaceutico	16 dicembre

**SPAZIO  
ADV**

**LE INDUSTRIE CHIMICHE CHE  
UTILIZZANO SOLO MATERIE  
PRIME VEGETALI E/O ANIMALI**

## C'è SPAZIO anche per la tua Azienda!

Per proposte pubblicitarie personalizzate contattare  
**domenicacipriani@agicom.it**



Marco Tagliabue<sup>a</sup>, Camilla Lanari<sup>b</sup>

<http://dx.medra.org/10.17374/CI.2026.108.1.46>

<sup>a</sup>Research and Development, Eni SpA, San Donato Milanese (MI), Italia

<sup>b</sup>Eni Rewind SpA, San Donato Milanese (MI), Italia

marco.tagliabue@eni.com

## L'EREDITÀ AMBIENTALE DELLE MINIERE

*Il trattamento delle acque acide di miniera (acidic mine drainages, AMD) è essenziale nei siti minerari attivi e dismessi. Lo sviluppo tecnologico deriva soprattutto da studi effettuati negli USA e nel Regno Unito, da cui l'uso estensivo della terminologia anglosassone. I processi passivi, ispirati alla natura e integrabili nel paesaggio, sono interessanti ma non sempre applicabili. È presentato anche un confronto critico con i processi attivi tradizionali basati su reagenti chimici ed fonti energetiche industriali.*

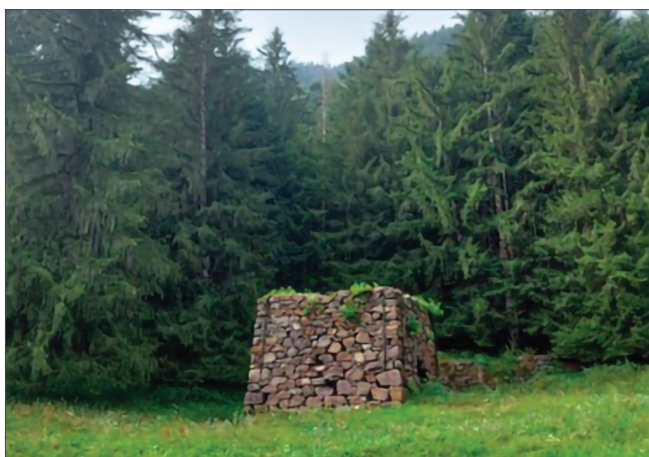


Fig. 1 - Le raglane, i forni per la cottura del minerale di ferro a testimonianza dell'attività estrattiva in Val di Scalve nei pressi di Schilpario (BG), Italia



Fig. 2 - Le roste, i cumuli di detriti dall'attività estrattiva nelle Colline Metallifere nei pressi di Gavorrano (GR), Italia (cortesia di Luca Serbolisca, Eni SpA)

### La chimica inorganica in miniera

L'attività estrattiva ha fornito e continua a fornire le fonti di energia e le materie prime essenziali per il progresso tecnologico. Dove si è maggiormente sviluppata ha avuto un impatto pervasivo sul territorio, persistente anche dopo il termine delle operazioni di coltivazione (Fig. 1 e 2). In Italia l'attività estrattiva è stata il nucleo attorno al quale si è sviluppata l'industria, con particolare riferimento a quella dei prodotti chimici di base (e.g., l'acido bórico, l'acido solforico, l'idrossido di sodio, il cloro, i fertilizzanti, gli idrocarburi) [1]. Il caso più eclatante è quello dei siti delle Colline Metallifere in Toscana che hanno progressivamente raggiunto un loro equilibrio ecologico sino a giustificare la creazione di un Parco Nazionale dedicato [2].

L'attività estrattiva non è però solo un retaggio del passato: la carenza degli elementi strategici per l'applicazione delle nuove tecnologie (e.g., il litio, le terre rare, il boro, il rame) sta portando a valutare il riavvio delle operazioni di coltivazione [3] e la valorizzazione dei cumuli di detriti [4].

Le acque reflue provenienti dal drenaggio dei vuoti (i.e., le gallerie ed i pozzi) e dal dilavamento dei cumuli di detriti sono denominate acque acide di miniera, *acidic mine drainages* (AMD) [5]. Si tratta di acque chimicamente aggressive con un pH basso (i.e., generalmente compreso tra 2,0 e 6,0, in casi sporadici addirittura negativo) [6] ed elevati livelli di ioni eco-tossici. Queste devono essere trattate prima del rilascio nell'ambiente (Tab. 1) [7]. Sovente le miniere si trovano in luoghi remoti dove



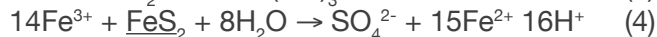
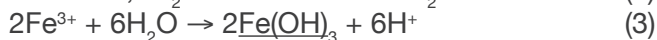
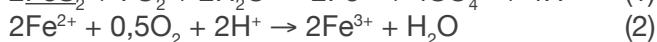


Proprietà	Unità	Limite
pH	-	5,5-9,5
Alluminio	mg/L	1,0
Ferro	mg/L	2,0
Manganese	mg/L	2,0
Solfato	mg/L	1000
Cadmio	mg/L	0,02
Rame	mg/L	0,1
Piombo	mg/L	0,2
Nichel	mg/L	2,0
Zinco	mg/L	0,5

Tab. 1 - Limiti di legge per lo scarico in un corpo idrico superficiale, rispettivamente, per il pH e gli ioni eco-tossici generalmente presenti nelle AMD [7]

l'accesso ai servizi tecnologici e la logistica sono complicati. In più, a meno delle perturbazioni indotte dagli eventi naturali (e.g., la siccità, il gelo, le piogge, gli smottamenti del terreno), la portata e le caratteristiche chimico-fisiche di ciascuna AMD possono mantenersi invariate per decenni o addirittura secoli. Ciò impone lo sviluppo e l'applicazione di tecnologie efficaci, affidabili e sostenibili per lunghissimi periodi di servizio.

La pirite,  $\text{FeS}_2$ , anche quando minoritaria nella composizione del minerale, è la principale fonte di acidità (ACY), ferro e solfato. La sua progressiva dissoluzione per ossidazione può essere schematizzata secondo le equazioni 1-4 [5]:

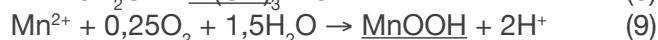
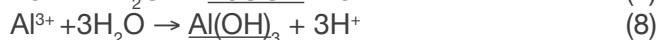
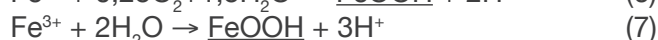
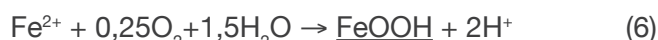


dove, le specie sottolineate sono solidi a temperatura ambiente.

L'alluminio ed il manganese, rilasciati dai feldspati, dalle miche, dalle argille, dai carbonati e dagli ossidi (e.g., l'albite,  $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ , la muscovite,  $\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH}, \text{F})_2$ , la caolinite,  $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ , la pirolusite,  $\text{MnO}_2$ ), sono frequentemente presenti come ulteriori ioni eco-tossici, contribuendo alla ACY, generalmente espressa come mg/L di carbonato di calcio, secondo l'equazione 5:

$$\text{ACY} = \left( \frac{3C_{\text{Fe}^{3+}}}{M_{\text{Fe}^{3+}}} + \frac{2C_{\text{Fe}^{2+}}}{M_{\text{Fe}^{2+}}} + \frac{2C_{\text{Mn}^{2+}}}{M_{\text{Mn}^{2+}}} + \frac{3C_{\text{Al}^{3+}}}{M_{\text{Al}^{3+}}} + 1000 \cdot 10^{-\text{pH}} \right) \left( \frac{M_{\text{CaCO}_3}}{2} \right) \quad (5)$$

dove  $M_{\text{CaCO}_3}$  è il peso molecolare del carbonato di calcio in mg/mole,  $C_{\text{Me}^{n+}}$  è la concentrazione in mg/L dello ione generico  $\text{Me}^{n+}$  che reagisce con l'acqua in ambiente ossidante come acido di Lewis per liberare N ioni idrogeno secondo le equazioni 6-9:



dove  $C_{\text{Me}^{n+}}$  è il peso atomico di  $\text{Me}^{n+}$ .

I trattamenti chimico-fisici si basano generalmente sulle equazioni 6-9 in cui il ferro, l'alluminio ed il manganese vengono rimossi dalle AMD come ossidi idrati poco solubili che a loro volta possono fungere da catalizzatori di ossidazione ed adsorbenti di altri ioni eco-tossici eventualmente presenti (e.g., il ferro ossido idrato adsorbe efficacemente gli osso-ioni dell'arsenico e dell'antimonio [8]).

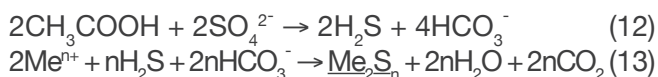
Il carbonato di calcio è uno dei principali donatori di alcalinità, ALK, secondo le equazioni 10, 11:



dove l'equazione 11 si riferisce al tampone tra l'acido carbonico e l'idrogeno-carbonato, in grado di stabilizzare il pH a 6,4 [9]. L'acido carbonico è instabile e tende a decomporsi in anidride carbonica ed acqua. In presenza di una geologia favorevole, si può avere la completa neutralizzazione delle AMD a dare le acque neutre di miniera, *neutral mine drainages* (NMD). In queste comunque permangono livelli elevati di alcuni ioni eco-tossici (e.g., il solfato) [10]. I trattamenti chimico-fisici citati non hanno alcun effetto sul solfato per il quale è stata suggerita la rimozione biologica mediante i batteri solfato-riduttori (SRB). In condizioni riducenti (i.e., tali da determinare un potenziale di ossido-riduzione, *oxidation-reduction potential*, ORP, negativo), con un pH attorno a 7,0 ed in presenza di un substrato organico a basso tenore di carbonio (e.g., l'acido acetico,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ), il solfato può essere convertito biologicamente in solfuro che a sua volta può reagire con il ferro, il manganese e gli altri ioni eco-tossici eventualmente presenti, (e.g., lo zinco, il nichel, il rame, il cadmio, il piombo, l'arsenico, l'antimonio),



a dare i rispettivi solfuri poco solubili e generando l'idrogeno-carbonato, secondo le equazioni 12, 13:



dove  $\text{Me}_2\text{S}_n$  è il solfuro poco solubile di  $\text{Me}^{n+}$ .

Le condizioni riducenti possono essere indotte attraverso l'aggiunta di compost, mentre il pH può essere controllato secondo le equazioni 10, 11.

I principali svantaggi di questo trattamento biologico sono la necessità di un pH controllato per garantire l'efficacia degli SRB ed il potenziale rilascio di gas velenoso idrogeno solforato. Ciò ne impone l'applicazione in ambienti dotati di un sistema di trattamento delle emissioni, preferibilmente chiusi (e.g., gli stessi vuoti delle miniere opportunamente isolati dall'esterno).

Va sottolineato come il solfato sia eco-tossico solo a livelli molto elevati secondo la Tab. 1 [5]. Il suo livello deve essere limitato soprattutto per evitare il deterioramento dei manufatti in calcestruzzo ed in acciaio. A tale scopo, possono essere applicati i trattamenti chimico-fisici basati sulla precipitazione, sullo scambio ionico o sulle separazioni a membrana [11].

## I trattamenti attivi ed i trattamenti passivi: come e quando

I trattamenti delle AMD possono seguire un approccio attivo o passivo.

I trattamenti attivi sono basati su reagenti chimici, più raramente biologici e fonti energetiche industriali. Generalmente, comprendono le operazioni di ossidazione, neutralizzazione e sedimentazione, *oxidation, dosing with alkali and sedimentation* (ODAS), con eventuali operazioni aggiuntive per soddisfare le specifiche per l'acqua più rigorose (e.g., lo scambio ionico, le separazioni a membrana, la biodegradazione) [5]. Sono stati gli unici trattamenti disponibili fino agli anni Novanta ed i criteri di progettazione sono ben consolidati essendo basati su apparecchiature convenzionali (e.g., le vasche ed i recipienti in cui far avvenire le reazioni chimiche o biologiche, le pompe idrauliche per la circolazione dell'acqua).

Il reagente ossidante è il perossido di idrogeno ed i reagenti neutralizzanti sono in alternativa il sodio

idrossido, il calcio idrossido, il calcio ossido o l'ammoniaca.

I reagenti sono dosati attraverso dispositivi elettro-meccanici (e.g., le tramogge o le coclee per i solidi, le pompe idrauliche o i regolatori flusso per i fluidi) fino al pH di 8,0 per rimuovere il ferro, l'alluminio ed il manganese, secondo le equazioni 6-9.

Le reazioni chimiche o biologiche avvengono in un'unica fase liquida con tempi di contatto di poche ore.

I trattamenti attivi richiedono una manutenzione frequente.

Sono possibili interventi quotidiani per adattarli alle diverse condizioni ambientali (e.g., la regolazione puntuale delle condizioni d'esercizio in base alle variazioni nella portata o nelle caratteristiche chimico-fisiche delle AMD).

Le infrastrutture dedicate ai trattamenti attivi hanno un'estetica industriale, difficile da integrare nel paesaggio circostante.

Sono disponibili sul mercato unità compatte trasportabili anche in luoghi remoti.

I trattamenti passivi sono basati su agenti chimici o biologici e fonti energetiche naturali [5]. Va sottolineato come non siano semplici operazioni di rinaturalizzazione ma siano invece veri e propri processi chimici non-convenzionali, ispirati ai meccanismi naturali di risanamento. Le prime applicazioni pionieristiche risalgono agli anni Ottanta ed i criteri di progettazione rimangono parzialmente empirici, nonostante gli studi effettuati soprattutto nei Paesi con un'attività estrattiva importante (e.g., gli USA, il Regno Unito, a seguito della dismissione di parte dell'attività estrattiva nazionale negli anni Novanta) [12-16]. La circolazione dell'acqua avviene attraverso canali, lagune, dreni e zone umide artificiali seguendo il gradiente topografico. Il reagente ossidante è l'ossigeno atmosferico e l'ossidazione avviene promuovendo il contatto mediante cascate o percorsi tortuosi artificiali. Il reagente neutralizzante è il calcare, preferibilmente ricco di calcite,  $\text{CaCO}_3$ , fino al pH di 6,4, secondo le equazioni 10, 11 e la neutralizzazione avviene mediante la percolazione attraverso dreni calcarei o lo scorrimento in canali artificiali disseminati di ciottoli di calcare. Conseguentemente, le reazioni chimiche o biologiche avvengono alle inter-fasi. Ciò rende necessari tempi di contatto di molte ore, ottenibili mediante infra-



strutture di grandi dimensioni, nonostante i recenti tentativi di compattazione [17].

I trattamenti passivi richiedono una manutenzione poco frequente anche se regolare.

Non sono possibili interventi quotidiani per adattarli alle diverse condizioni ambientali e questa loro rigidità può ridurne l'efficacia al verificarsi di condizioni ambientali impreviste o estreme.

Le infrastrutture dedicate ai processi passivi hanno un'estetica naturale, facile da integrare nel paesaggio circostante.

L'investimento in conto capitale, *capital expenditure* (CAPEX), è generalmente maggiore di quello dei corrispondenti trattamenti attivi a causa delle opere civili necessarie per la costruzione delle infrastrutture di grandi dimensioni, mentre il costo operativo, *operating expenditure* (OPEX), è inferiore grazie alla manutenzione poco frequente.

L'analisi del ciclo di vita, *life-cycle analysis* (LCA), favorisce i trattamenti passivi, soprattutto per le applicazioni più piccole [18].

Entrambi gli approcci devono considerare la gestione dei rifiuti prodotti (e.g., i fanghi, i concentrati liquidi generalmente non-biodegradabili). Devono anche essere gestiti il monitoraggio ambientale, la manutenzione (e.g., i lavaggi delle vasche e delle tubazioni, il dragaggio delle lagune e delle zone umide artificiali, le reintegrazioni del calcare e del compost, rispettivamente), i vincoli di sicurezza, i criteri di cessazione della qualifica di rifiuto, *end of waste* (EoW), nel caso dell'impiego di scarti provenienti da altri processi (e.g., gli scarti agricoli utilizzati per la preparazione del compost) e le esigenze delle parti interessate (e.g., gli Enti, l'opinione pubblica). In base a questa lunga lista di attività imprescindibili, l'aggettivo "passivi" è fuorviante, lasciando intravedere una capacità di auto-regolazione di questo tipo di trattamenti tale da non richiedere alcun intervento umano.

Per i trattamenti passivi sono disponibili alberi decisionali basati sulle caratteristiche chimico-fisiche delle AMD e del sito minerario, per una corretta progettazione (Fig. 3) [5, 13, 16, 19].

Per portate superiori a 50 L/s (4320 m<sup>3</sup>/d), ACY superiori a 800 mg/L di calcio carbonato (i.e., indice di alti livelli di ferro, alluminio e manganese, secondo l'equazione 5), pH inferiori a 2,0, i trattamenti attivi sono l'opzione migliore [19]. Così anche nel caso lo



Fig. 3 - La caratterizzazione chimico-fisica delle AMD è il primo passo (cortesia di Luca Serbolisca, Eni SpA)

spazio disponibile presso il sito minerario sia limitato, come verrà illustrato nel paragrafo successivo. La tendenza è verso un'applicazione sinergica dei due approcci in modo da sfruttare i rispettivi vantaggi (Tab. 2), a dare i trattamenti semi-passivi (e.g., circolazione dell'acqua tra le lagune artificiali attraverso pompe idrauliche mosse da energie rinnovabili, aggiunta di flocculanti di origine industriale per favorire la sedimentazione, inserimento di bio-reattori tradizionali per il controllo puntuale dell'attività batterica, applicazione di sistemi di controllo remoto di processo) [20].

### Un caso-studio di trattamento passivo

Il trattamento passivo delle AMD contenenti ferro, alluminio e manganese può essere organizzato secondo una sequenza di operazioni (Fig. 4) [12]:

- neutralizzazione dell'acqua in ingresso mediante percolazione attraverso un dreno calcareo ridu-

Caratteristiche	Trattamenti Attivi	Trattamenti Passivi
Progettazione	+	-
Manutenzione	-	+
Flessibilità	+	-
Dimensioni	+	-
Estetica	-	+
CAPEX	+	-
OPEX	-	+

Tab. 2 - Trattamenti attivi vs. trattamenti passivi delle AMD (+: vantaggioso; -: svantaggioso). Per il significato degli acronimi e gli ulteriori dettagli si rimanda al testo

cente, *reducing and alkalinity producing system* (RAPS), per un tempo di contatto di almeno 14 ore fino all'instaurazione di un pH di 6,4, secondo le equazioni 10, 11. Il percolato viene raccolto sul fondo del RAPS attraverso una rete di tubazioni forate collegate ad un sifone. Le condizioni riducenti, indotte aggiungendo un substrato organico al calcare servono per limitare l'ossidazione del ferro e la conseguente precipitazione del rispettivo ossido idrato all'interno del dreno calcareo sino a causare la passivazione del calcare (*armoring*), o addirittura l'intasamento. Diversamente, per l'alluminio che ha un solo numero di ossidazione, il rischio di precipitazione del rispettivo ossido idrato permane. Pertanto, i RAPS sono sconsigliati per le AMD con livelli di alluminio maggiori di 1 mg/L;

- ossidazione dell'acqua in uscita dal RAPS mediante una serie di cascate artificiali per favorire il contatto con l'ossigeno atmosferico con la rimozione massiva del ferro e dell'alluminio come ossidi idrati, secondo le equazioni 6-8. Questi sono successivamente sedimentati in una laguna artificiale. La rimozione del manganese secondo l'Equazione 9 è poco efficiente, per cui è necessaria un'operazione dedicata;
- rimozioni, rispettivamente, del manganese e del ferro residuo dall'acqua in uscita dalla laguna artificiale in una zona umida aerobica artificiale (*aerobic wetland*, AeW), in presenza di batteri ossidanti. Il ferro, se presente in forma ridotta, inibisce la rimozione del manganese. Le AeW sono lagune poco profonde, disseminate di ciottoli di calcare e piantumate per facilitare il contatto dell'acqua con l'ossigeno atmosferico ed indurre la rizo-filtrazione (*i.e.*, i fasci di radici agiscono sia da contattori che da filtri). La rimozione del manganese avviene secondo equazioni 15, 16 [5]:

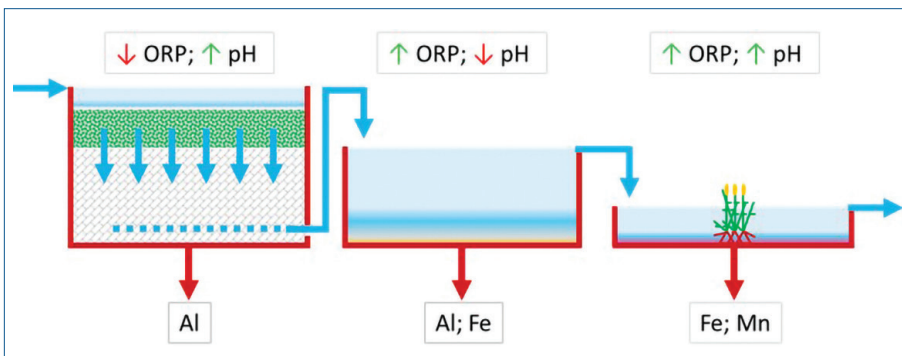
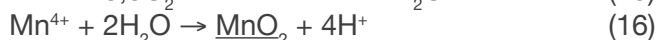


Fig. 4 - Un possibile trattamento passivo delle AMD. Da sinistra verso destra: il RAPS per la neutralizzazione e la rimozione parziale dell'alluminio (in verde il substrato organico; in grigio il calcare); le cascate e la laguna artificiale per le rimozioni massive del ferro e dell'alluminio; la AeW per la rimozione massiva del manganese e parziale del ferro. Per il significato degli acronimi e gli ulteriori dettagli si rimanda al testo

Supponendo una portata di AMD di 2 L/s (173 m<sup>3</sup>/d), con un livello di manganese di 20 mg/L, da rimuovere fino a 2,0 mg/L per lo scarico in un corpo idrico superficiale (Tab. 1) [7], lo spazio richiesto dalla sola AeW è pari a 622 m<sup>2</sup>, secondo il tasso medio di rimozione del manganese di 5,0 g/(d·m<sup>2</sup>) riportato in letteratura [16]. È una richiesta di spazio importante che non comprende le infrastrutture ancillari da attivare nei casi di manutenzione o emergenza (*e.g.*, le lagune di accumulo ed omogeneizzazione delle AMD, i sistemi di controllo-lavaggio).

## Conclusioni

L'approccio ispirato ai meccanismi naturali di risanamento, l'estetica facilmente integrabile nel paesaggio e la novità rendono intriganti i processi passivi di trattamento delle AMD. La loro applicabilità è però preclusa nel caso di portate e ACY particolarmente elevate. I processi passivi non sono inoltre applicabili in siti minerari con una limitata disponibilità di spazio. In questi casi, i tradizionali trattamenti attivi rimangono la soluzione migliore. La tendenza è verso un'applicazione sinergica dei due approcci a dare i trattamenti semi-passivi, traendo vantaggio dai sistemi sempre più efficienti per lo sfruttamento delle energie rinnovabili e per il controllo remoto di processo.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] P. Amat di San Filippo, The Italian Chemical Industry from 1861 to 1918 in The Chemical Industry in Europe, 1850-1914: Industrial





- Growth, Pollution and Professionalization, Springer Nature, Dordrecht (NL), 1998, DOI: [10.1007/978-94-017-3253-6](https://doi.org/10.1007/978-94-017-3253-6)
- [2] Un Viaggio attraverso miniere, storia, natura ed innovazione, Parco Nazionale delle Colline Metallifere, <https://parcocollinemetallifere.it/> ultimo accesso 18 agosto 2025.
- [3] ISPRA, Materie Prime Critiche: ecco quali e dove si trovano, ISPRA, Roma, I, 2024, <https://www.isprambiente.gov.it/files/2024/area-stampa/comunicati-stampa/comunicato-stampa-materie-prime.pdf>, ultimo accesso 12 novembre 2025.
- [4] H.M. Stander, J.L. Broadhurst, *Resources*, 2021, **10**, 35, DOI: [10.3390/resources10040035](https://doi.org/10.3390/resources10040035)
- [5] P.L. Younger, S.A. Banwart, R. Hedin, *Mine Water - Hydrology, Pollution, Remediation*, Springer Nature, Dordrecht (NL), 2002, DOI: [10.1007/978-94-010-0610-1](https://doi.org/10.1007/978-94-010-0610-1)
- [6] D.K. Nordstrom, D.W. Blowes, *et al.*, *Appl. Geochem.*, 2015, **57**, 3, DOI: [10.1016/j.apgeochem.2015.02.008](https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2015.02.008)
- [7] MASE, Attuazione Direttiva 91/271/CEE, MASE, Roma, I, 2025, <https://www.mase.gov.it/portale/attuazione-direttiva-91-271-cee>, ultimo accesso 18 agosto 2025.
- [8] M. Tagliabue, R. Bagatin *et al.*, *Desal. Water Treat.*, 2017, **69**, 294, DOI: [10.5004/dwt.2017.0664](https://doi.org/10.5004/dwt.2017.0664)
- [9] G. Charlot, *Analisi Chimica Quantitativa - Equilibri in Soluzione*, Piccin, Padova, 1977.
- [10] G. Nielsen, I. Hatam *et al.*, *Water Res.*, 2018, **140**, 268, DOI: [10.1016/j.watres.2018.04.035](https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.04.035)
- [11] H. Runnti, E.T. Tolonen *et al.*, *Environ. Research*, 2018, **167**, 207, DOI: [10.1016/j.envres.2018.07.018](https://doi.org/10.1016/j.envres.2018.07.018)
- [12] P.L. Younger, *Passive Treatment of European Mine Waters: The European Commission's PIRAMID Project*, International Mine Water Association, IMWA, Symposium, Belo Horizonte, BR, 2001, [https://www.imwa.info/docs/imwa\\_2001/Passive.pdf](https://www.imwa.info/docs/imwa_2001/Passive.pdf), ultimo accesso 26 agosto 2025.
- [13] PIRAMID, Engineering Guidelines for the Passive Remediation of Acidic or Metalliferous Mine Drainage and Similar Wastewaters, EU 5<sup>th</sup> framework RTD project # EVK1-CT-199 Passive in-situ remediation of acidic mine and industrial drainage, PIRAMID, University of Newcastle upon Tyne, Newcastle Upon Tyne, GB, 2003, <https://www.imwa.info/piramid/files/PIRAMIDGuidelinesv10.pdf>, ultimo accesso 18 agosto 2025.
- [14] G.R. Watzlaf, K.T. Schroeder, *et al.*, *The Passive Treatment of Coal Mine Drainage*, USDoE, Pittsburgh, USA, 2004, [https://static1.squarespace.com/static/66538a984fd76619def08681/t/66aa78e24fffc267d00c0f1d/1722448098274/DOE\\_Passive\\_Treatment\\_Manual.pdf](https://static1.squarespace.com/static/66538a984fd76619def08681/t/66aa78e24fffc267d00c0f1d/1722448098274/DOE_Passive_Treatment_Manual.pdf), ultimo accesso 18 agosto 2025.
- [15] D. Barrie Johnson, K.B. Hallberg, *Rev. Environ. Sci. Bio/Technol.*, 2002, **1**, 335, DOI: [10.1023/A:1023219300286](https://doi.org/10.1023/A:1023219300286)
- [16] J. Skousen, C.E. Zipper *et al.*, *Mine Water Environ.*, 2017, **36**, 133, DOI: [10.1007/s10230-016-0417-1](https://doi.org/10.1007/s10230-016-0417-1)
- [17] D. Sapsford, A. Barnes *et al.*, *Mine Water Environ.*, 2007, **26**, 243, DOI: [10.1007/s10230-007-0012-6](https://doi.org/10.1007/s10230-007-0012-6)
- [18] T.J. Hengen, M.K. Squillace *et al.*, *Resour. Conserv. Recycl.*, 2014, **86**, 160, DOI: [10.1016/j.resconrec.2014.01.003](https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2014.01.003)
- [19] D. Trumm, *N.Z. J. Geol. Geophys.*, 2010, **53**, 195, DOI: [10.1080/00288306.2010.500715](https://doi.org/10.1080/00288306.2010.500715)
- [20] R. Kleinmann, A. Sobolewsky *et al.*, *Mine Water Environ.*, 2023, **42**, 170, DOI: [10.1007/s10230-023-00922-w](https://doi.org/10.1007/s10230-023-00922-w)

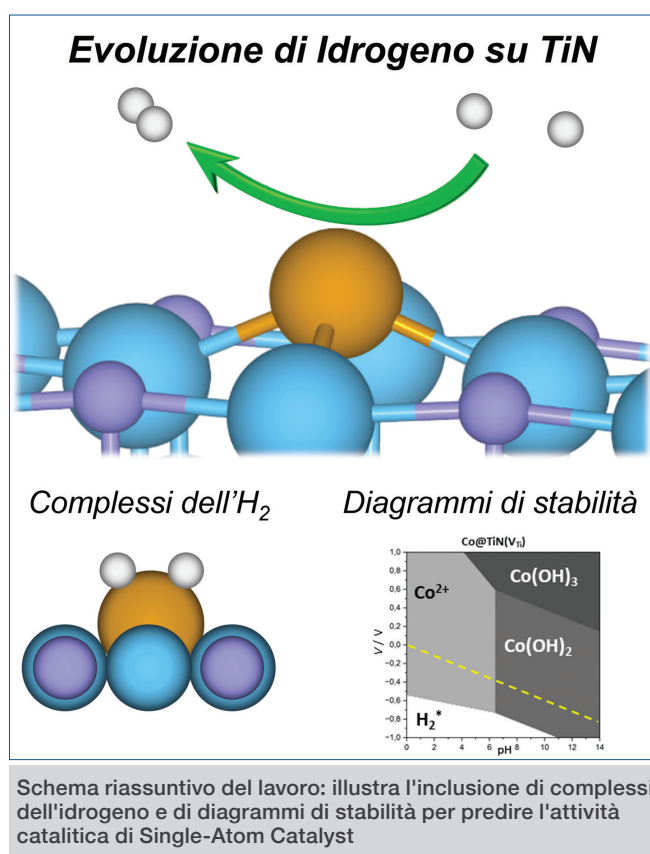
### The Environmental Heritage of Mines

The treatment of acidic mine drainage (AMD) is essential at both active and abandoned mining sites. Technological development has mainly resulted from studies conducted in the USA and the United Kingdom, which explains the extensive use of Anglo-Saxon terminology. Passive treatment processes, inspired by natural systems and easily integrated into the surrounding landscape, are appealing but not always applicable. A critical comparison with traditional active treatment processes based on chemical reagents and industrial energy sources is also presented.



# CATALISI A SINGOLO ATOMO: COSA CONTA DAVVERO

*La produzione sostenibile di idrogeno richiede catalizzatori efficienti e stabili per la reazione di evoluzione dell'idrogeno (HER). In questo contributo viene presentato uno studio teorico basato sulla teoria del funzionale della densità (DFT) su catalizzatori a singolo atomo (SAC) supportati su nitrato di titanio (TiN) e sullo studio del meccanismo della HER sui SAC. Il lavoro evidenzia come la descrizione accurata degli intermedi di reazione e delle condizioni operative sia cruciale per uno screening affidabile di nuovi materiali catalitici.*



## Introduzione

L'idrogeno è considerato uno dei principali vettori energetici per una transizione verso sistemi a basse emissioni di carbonio. La sua produzione tramite elettrolisi dell'acqua è tuttavia fortemente dipendente dall'efficienza dei catalizzatori coinvolti nella reazione di evoluzione dell'idrogeno (HER). I catalizzatori

a singolo atomo (Single-Atom Catalysts, SACs) [1], composti da atomi metallici singoli dispersi su un supporto solido al momento rappresentano una strategia promettente. Essi, infatti, consentono di massimizzare l'utilizzo del metallo attivo e di ottenere siti catalitici ben definiti, come in catalisi omogenea, rendendo semplice al tempo stesso la separazione dei prodotti, come in catalisi omogenea. Al contempo, la loro progettazione razionale richiede strumenti predittivi affidabili in grado di valutare non solo l'attività, ma anche la stabilità in condizioni operative realistiche; per questo ci si affida a simulazioni che permettono di accedere al livello atomico di questi oggetti.

## Metodi

Nello studio è stato utilizzato un approccio computazionale basato sulla teoria del funzionale della densità (DFT) per studiare SACs ancorati su nitrato di titanio (TiN) [2], un supporto conduttivo e chimicamente robusto. È stato creato un piccolo database di 16 catalizzatori usando 8 metalli ancorati nelle vacanze di azoto o titanio del nitrato; di questi si è indagata la reattività e la stabilità grazie all'uso dei diagrammi di Pourbaix. Oltre alla descrizione convenzionale dell'intermedio adsorbito  $H^*$ , lo studio ha messo in evidenza il ruolo di intermedi non convenzionali, come complessi molecolari di idrogeno legati al sito metallico [3]. Particolare attenzione è stata dedicata alla scelta del funzionale di scambio correlazione e alla valutazione della stabilità dei singoli atomi in funzione del pH e del potenziale applicato, aspetti spesso trascurati negli screening teorici semplificati [4].

A Clara Saetta è stato conferito il "Premio di laurea Nordio" 2025 dalla Divisione di Chimica teorica e computazione della SCI.



## Risultati

In questa sezione viene mostrato come la progressiva inclusione di dati che ci fanno avvicinare alla complessità sperimentale, ci guidi verso la riduzione di candidati promettenti a partire dal database iniziale. Infatti, i risultati ottenuti mostrano che l'attività catalitica prevista può cambiare significativamente quando si includono intermedi alternativi al classico  $H^*$ . In diversi casi, la formazione di complessi dell' $H_2$  risulta energeticamente competitiva e modifica il meccanismo di reazione, riducendo il numero di catalizzatori attivi da sedici a dodici, considerando il solo  $H^*$ , fino a 6, considerando la formazione di complessi. Questa è un'ulteriore evidenza che i SACs presentano similarità con catalizzatori omogenei e complessi di coordinazione, sottolineando la necessità di un proprio approccio di modeling. Inoltre, l'analisi della stabilità evidenzia che non tutti i sistemi teoricamente attivi sono effettivamente sostenibili in condizioni elettrochimiche realistiche, riducendo il numero di candidati realmente promettenti a due sui sedici catalizzatori investigati: Pd e Pt su TiN con vacanza di azoto. Questo risultato è di particolare interesse, in quanto possiamo trovare in letteratura lavori che riportano proprio l'uso di tali metalli supportati su TiN per l'evoluzione di idrogeno. Tutto ciò va a riprova del fatto che l'accuratezza del modello non è fine a sé stessa ma è necessaria a spiegare o addirittura predire le proprietà catalitiche dei materiali. In generale, questi aspetti suggeriscono che il solo descrittore termodinamico basato sull'energia di adsorbimento dell'idrogeno non è sufficiente per una valutazione completa delle prestazioni dei SACs, evidenziando la necessità di un framework teorico unico differente in cui modellare questa particolare classe di catalizzatori. Una discussione più completa esaustiva si può trovare al link <https://doi.org/10.1002/sml.202401058>.

## Implicazioni e prospettive

Dal punto di vista applicativo, lo studio fornisce criteri più robusti per lo screening computazionale di catalizzatori per la reazione di evoluzione di idrogeno. L'utilizzo di supporti come il nitruro di titanio (TiN), combinato con una descrizione teorica più realistica, apre la strada allo sviluppo di materiali efficienti e potenzialmente meno costosi rispetto ai catalizzatori nobili tradizionali. L'integrazione sistematica di attività e stabilità nei modelli computazionali rappresenta un passo fondamentale verso una progettazione ra-

zionale di catalizzatori per la produzione sostenibile di idrogeno, guardando a una collaborazione tra mondo sperimentale e mondo computazionale più comunicativa ed efficace.

## Conclusioni

Il contributo dimostra come un approccio DFT avanzato, che tenga conto di intermedi di reazione non convenzionali e di condizioni operative realistiche, sia essenziale per valutare in modo affidabile i catalizzatori a singolo atomo per la reazione di evoluzione dell'idrogeno. Ciò si va a contrapporre al tradizionale studio dei Single-Atom Catalysts, che normalmente vengono modellati ispirandosi alla catalisi eterogenea. Tuttavia, questi oggetti sono reminiscenti dei complessi di coordinazione che si usano in catalisi omogenea, suggerendo la necessità dell'approccio ibrido che è stato usato in questo lavoro. I risultati forniscono una "guida" utile per futuri studi teorici e sperimentali nel campo della catalisi elettrochimica a singolo atomo.

## Ringraziamenti

Si ringraziano Gianfranco Pacchioni, Livia Giordano, Giovanni Di Liberto e Ilaria Barlocco per il supporto scientifico e le preziose discussioni.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] X.F. Yang, A. Wang *et al.*, *Acc. Chem. Res.*, 2013, **46**(8), 1740.
- [2] C. Saetta, I. Barlocco *et al.*, *Small*, 2024, **20**(37), 2401058, DOI: <https://doi.org/10.1002/sml.202401058>
- [3] G. Di Liberto, L.A. Cipriano, G. Pacchioni, *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, **143**(48), 20431.
- [4] G. Di Liberto, L. Giordano, G. Pacchioni, *ACS Catal.*, 2024, **14**(1), 45.

### Single-Atom Catalysis: What Really Matters

Sustainable hydrogen production relies on efficient and durable catalysts for the hydrogen evolution reaction (HER). Here we present a density functional theory study on single atom catalysts (SACs) supported on titanium nitride (TiN) with a focus on HER mechanism on SACs. The work highlights the importance of accurately describing reaction intermediates and operating conditions to achieve reliable computational screening of HER catalysts.





# DESIGN MOLECOLARE DI LUBRIFICANTI *BIO-BASED*

*Il presente articolo, tratto dalla tesi di dottorato dell'autore premiata come Miglior Tesi di Dottorato 2025 dalla Divisione di Chimica Industriale della SCI, evidenzia il ruolo centrale delle relazioni struttura-proprietà degli esteri nel design razionale di basi lubrificanti con caratteristiche mirate, anche a partire da matrici complesse come gli oli vegetali esausti (UCO).*

## Lubrificanti *bio-based* da oli vegetali esausti

La crescente attenzione verso la sostenibilità di processi e prodotti industriali ha portato il settore dei lubrificanti a rivalutare criticamente le materie prime di origine petrolifera, favorendo l'impiego di risorse rinnovabili e di scarto [1]. In questo contesto si inserisce l'attività di ricerca svolta nell'ambito della tesi di dottorato dell'autore, dedicata allo sviluppo razionale di lubrificanti *bio-based*, con particolare attenzione a quelli ottenuti a partire da oli vegetali esausti (UCO, *Used Cooking Oils*).

Dal punto di vista chimico, i bio-lubrificanti sono esteri alchilici degli acidi grassi (FAEEs) che, godono di bassa tossicità, parziale o totale biodegradabilità e di proprietà lubrificanti superiori rispetto agli oli minerali [2]. Essi sono ottenuti principalmente da fonti vegetali [3]; tra queste, l'impiego di UCO favorisce l'adozione di modelli di economia circolare, evitando al contempo la competizione con la filiera alimentare e risultando coerente con diversi Obiettivi di Sviluppo Sostenibile (Fig. 1). Tuttavia, gli UCO rappresen-

tano matrici chimicamente complesse e variabili, costituite da miscele di trigliceridi, acidi grassi liberi e prodotti di degradazione formati durante i processi di cottura che, devono essere eliminati mediante operazioni di purificazione [4, 5]. Solo dopo essere stati raffinati, gli oli vegetali esausti possono essere trasformati in lubrificanti. Tra le diverse vie sintetiche disponibili per bio-lubrificanti a partire da UCO, la più adatta prevede l'idrolisi dei trigliceridi per ottenere acidi grassi liberi, seguita da una reazione di esterificazione acido-catalizzata con alcoli selezionati, finalizzata a sostituire lo scheletro del glicerolo ed a migliorare, *in primis*, la stabilità termica del prodotto finale [6]. Una rappresentazione schematica della filiera di produzione di lubrificanti *bio-based* da UCO è mostrata in Fig. 2.

La sola origine "verde" della materia prima, tuttavia, non è sufficiente a garantire prestazioni adeguate e reale interesse industriale: lo sviluppo di bio-lubrificanti ad alto valore aggiunto richiede un approccio razionale basato sulla comprensione delle relazioni



Fig. 1 - Fonti di lubrificanti *bio-based*

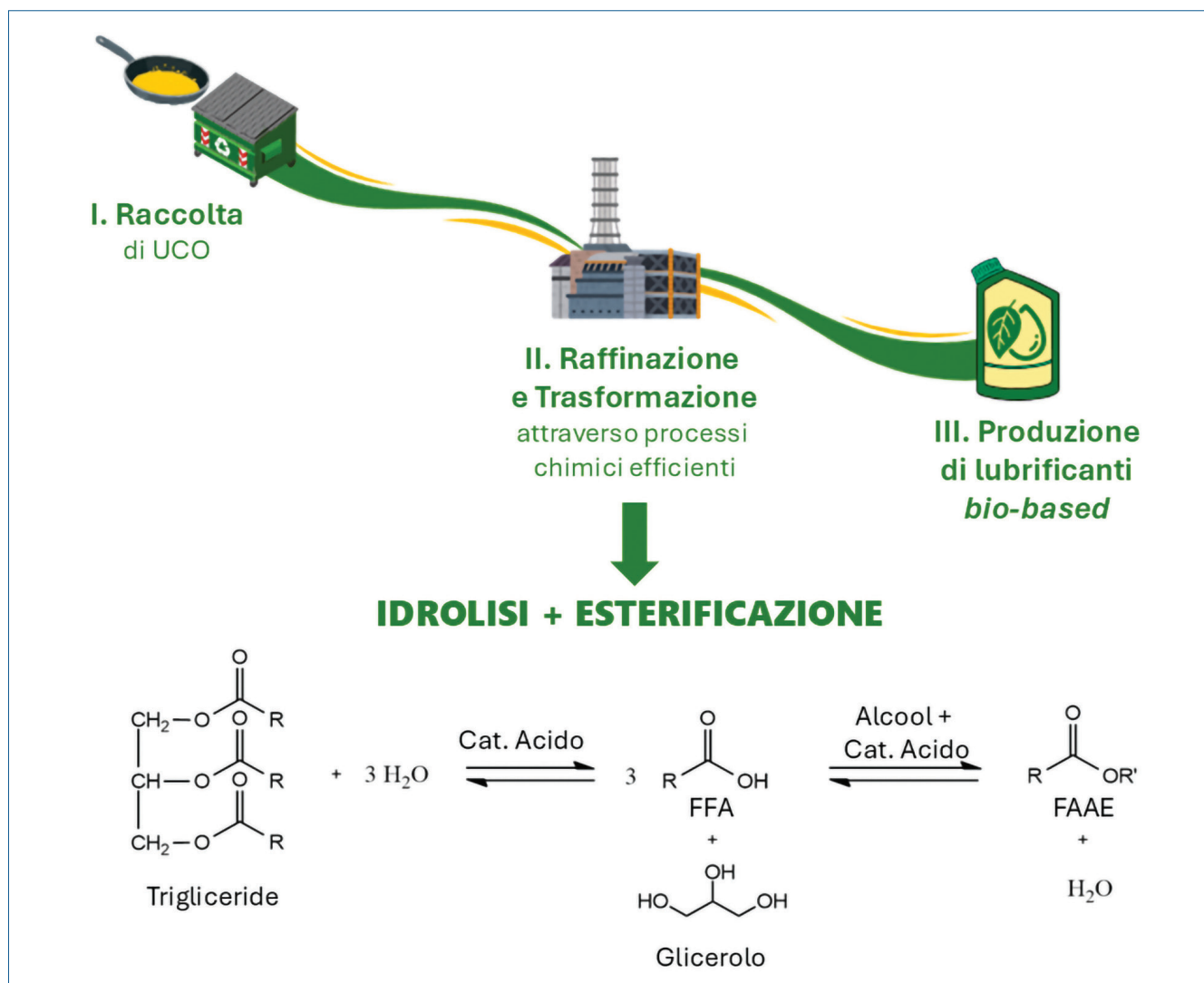


Fig. 2 - Rappresentazione schematica del processo di produzione di lubrificanti da UCO

tra struttura molecolare e proprietà chimico-fisiche del prodotto finale.

### Relazioni struttura-proprietà negli esteri degli acidi grassi

Lo studio delle relazioni proprietà-struttura, condotto su un'ampia serie di esteri sintetizzati, ha evidenziato come parametri dei materiali di partenza quali la lunghezza della catena, il grado di insaturazione e la presenza di ramificazioni influenzino in modo determinante proprietà chiave per l'impiego industriale del prodotto finale, tra cui viscosità, indice di viscosità, punto di scorrimento e stabilità ossidativa (Fig. 3). L'analisi ha incluso esteri derivati da acidi grassi insaturi, come l'acido oleico, e da acidi grassi sa-

turi quali pelargonico, laurico, miristico e palmitico, in combinazione con alcoli, dioli lineari e ramificati ( $\text{C}_2$ - $\text{C}_4$ ) e polioli di rilevanza industriale, come trimetilolpropano (TMP) e pentaeritritolo. In particolare, lo studio ha fornito risultati completamente nuovi per gli esteri dell'acido pelargonico [7], per i quali non erano disponibili in letteratura dati sistematici sulle proprietà chimico-fisiche. Inoltre, una parte significativa degli esteri investigati è costituita da composti completamente nuovi, sintetizzati e caratterizzati per la prima volta [7, 8].

È emerso come l'introduzione di ramificazioni svolga un ruolo chiave nel migliorare le proprietà di flusso alle basse temperature, riducendo il punto di scorrimento e ostacolando la cristallizzazione. Gli esteri




	 ELEVATA LUNGHEZZA DI CATENA	 ELEVATO GRADO DI RAMIFICAZIONE	 ELEVATO GRADO DI INSATURAZIONE
<b>VISCOSITA'</b>	✓	✓	✗
<b>INDICE DI VISCOSITA'</b>	✓	✗	✓
<b>POUR POINT</b>	✗	✓	✓
<b>STABILITA' OSSIDATIVA</b>	✓	✗	✗

Fig. 3 - Schema generale delle relazioni struttura-proprietà degli esteri. Il simbolo ✓ indica un effetto favorevole, corrispondente ad un aumento di viscosità, indice di viscosità e stabilità ossidativa, oppure a una riduzione del punto di scorrimento. Il simbolo x indica invece un effetto sfavorevole sulle proprietà considerate

ottenuti da polioli mostrano, inoltre, una combinazione favorevole di elevata viscosità, legata al maggiore peso molecolare, e bassi punti di scorrimento. Gli esteri derivati da acidi grassi saturi si distinguono invece per l'elevata stabilità ossidativa, ma presentano un punto di scorrimento più elevato che ne limita l'intervallo di utilizzo; tale limite può essere superato intervenendo sulla struttura della componente alcolica, ad esempio mediante l'impiego di dioli ramificati, che consente di ridurre significativamente il pour point preservando le altre proprietà del composto [8]. Nel complesso, il confronto con lubrificanti commerciali ha evidenziato prestazioni comparabili, ed in alcuni casi superiori, confermando il potenziale industriale di questi esteri.

## Dalle molecole pure agli UCO

Una volta definite le relazioni struttura-proprietà su sistemi molecolari semplici e controllati, è stato possibile trasferire tali conoscenze a matrici più complesse come gli UCO. Un esempio significativo è rappresentato dalla sintesi, condotta anche su scala pilota, di esteri a partire da UCO e TMP. Poiché l'olio utilizzato risultava ricco in acido oleico, l'estere ottenuto ha mostrato proprietà chimico-fisiche molto simili a quelle dell'estere sintetizzato da acido oleico puro e TMP, in accordo con quanto previsto dagli studi sui sistemi modello.

Dal punto di vista applicativo, l'estere UCO-TMP ha evidenziato prestazioni comparabili a quelle di un lubrificante commerciale *bio-based* impiegato come fluido idraulico, dimostrando come un approccio di progettazione razionale consenta di valorizzare feedstock complessi ottenendo prodotti con caratteristiche mirate e riproducibili. Una volta definita la

struttura della base, le prestazioni possono essere ulteriormente ottimizzate mediante l'impiego di additivi, completando la formulazione in funzione delle specifiche richieste applicative. In questo contesto, la chimica degli esteri si configura non solo come uno strumento di sostenibilità, ma come un mezzo efficace di progettazione del prodotto finale.

## Ringraziamenti

L'autore desidera ringraziare i supervisori della tesi di dottorato, i Professori Martino Di Serio e Vincenzo Russo, per il costante supporto scientifico ed il prezioso contributo alla definizione e allo sviluppo dell'attività di ricerca. Un sentito ringraziamento è inoltre rivolto al partner industriale del progetto, Itelyum Regeneration, per la collaborazione, il supporto tecnico e l'interesse dimostrato verso le potenziali applicazioni industriali dei risultati ottenuti.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] N.K. Attia, S.A. El-Mekkawi *et al.*, *Fuel*, 2020, **271**, 117578.
- [2] C.J. Reeves, A. Siddaiah, P.L. Menezes, *Springer International Publishing*, 2017, **3**, 11.
- [3] M. Kingsley, *Lube Magazine*, p. 24, Aug. 2021.
- [4] C.S.K. Lin *et al.*, *Energy Environ. Sci.*, 2013, **6**, 2.
- [5] A. Mannu *et al.*, *Resources*, 2019, **8**, 108.
- [6] S. Boyde, "Esters," in *Synthetics, Mineral Oils, and Bio-Based Lubricants*, CRC Press, 2020, pp. 45-76.
- [7] M.E. Fortunato *et al.*, *ACS Sustain. Chem. Eng.*, 2023, **11**, 33.
- [8] M.E. Fortunato *et al.*, *European Journal of Lipid Science and Technology*, 2025, **127**, 7.

## Molecular Design of Bio-based Lubricants

This article, based on the author's PhD thesis awarded as Best PhD Thesis 2025 by the Division of Industrial Chemistry of the Italian Chemical Society, highlights the central role of structure-property relationships of esters in the rational design of lubricant base oils with tailored properties, even when starting from complex matrices such as used cooking oils (UCO).





# STUDIO TERMICO DELL'UHMWPE BIOMEDICALE

***L'attività di ricerca che mi ha permesso di ottenere il "Premio per la miglior Tesi di Laurea Magistrale 2025" della Divisione di Chimica Industriale riguarda lo sviluppo e l'applicazione di un protocollo termico di Successive Self-Nucleation and Annealing all'UHMWPE di grado medicale, ottenendo per la prima volta il suo frazionamento termico e preziose informazioni utili alle applicazioni medicali.***

L'Ultra High Molecular Weight Polyethylene (UHMWPE) è un polimero utilizzato da oltre cinquant'anni come materiale di scorrimento nelle protesi ortopediche. A partire dagli anni Cinquanta, è prodotto utilizzando un processo di polimerizzazione per coordinazione promossa da catalizzatori Ziegler-Natta. L'UHMWPE, sintetizzato nel reattore sotto forma di polvere, deve essere consolidato tramite un processo ad alta temperatura e pressione (tipicamente *ram-extrusion* o *compression molding*), a causa dell'elevata viscosità del fuso. Dai semi-lavorati così ottenuti, vengono poi ricavati, per lavorazione meccanica, gli inserti protesici, che sono infine sterilizzati in vista dell'impianto.

La durata dell'impianto protesico è strettamente legata al rilascio di detriti da usura del polietilene, che favoriscono lo scollamento asettico (progressiva perdita di interazione tra la protesi e l'osso in assenza di infezione) e l'usura è, a sua volta, fortemente influenzata da fenomeni di degradazione ossidativa del polimero. Con l'obiettivo di ridurre l'usura e, quindi, di aumentare il tempo di sopravvivenza dell'impianto, fu introdotto, alla fine degli anni Novanta, il polietilene altamente reticolato (HXLPE). La reticolazione è ottenuta mediante irraggiamento con radiazioni ad alta energia; tuttavia, le specie radicaliche residue, dopo irraggiamento, possono causare un processo di ossidazione del materiale che ne deteriora le proprietà. Per contrastare la degradazione ossidativa, una strategia consiste nell'eseguire trattamenti termici post-irraggiamento: *annealing*, se eseguito al di sotto della  $T_m$  del polimero, o *remelting*, se al di sopra della  $T_m$  [1].

Una strategia alternativa prevede l'aggiunta di uno stabilizzante in grado di neutralizzare le specie radicaliche eventualmente generate durante l'intero ciclo di vita. Nell'UHMWPE biomedicale viene impiegato l' $\alpha$ -tocoferolo, un antiossidante biocompatibile, solubile nel polimero ma non nei fluidi corporei, che rimane quindi stabilmente incorporato nel materiale protesico [2].

Vista la delicatezza dell'applicazione e la varietà di trattamenti possibili, caratterizzare l'UHMWPE pre e post-impianto è essenziale per comprenderne le prestazioni cliniche e monitorare la qualità dei prodotti sul mercato.

In questo studio, si è esplorata la tecnica di Successive Self-Nucleation and Annealing (SSA), come nuovo strumento di caratterizzazione per ottenere informazioni sulla morfologia polimerica. La SSA sfrutta la capacità di segregazione molecolare dei polimeri semicristallini, attraverso cicli sequenziali di *self-nucleation* e *annealing*, per produrre un frazionamento termico del campione. Pur efficace su LDPE e LLDPE, l'applicazione dell'SSA all'UHMWPE è difficile, a causa della sua elevata linearità e della scarsità di difetti molecolari, tanto che, al momento, non ne sono riportati studi in letteratura [3].

Il progetto di tesi ha, quindi, mirato a definizione, ottimizzazione e applicazione di un protocollo termico di Successive Self-Nucleation and Annealing (SSA) su differenti tipologie di UHMWPE di interesse per il mercato biomedicale: dal vergine non processato (in polvere) al vergine estruso, dagli HXLPE trattati termicamente fino a *remelting* o ad *annealing*.

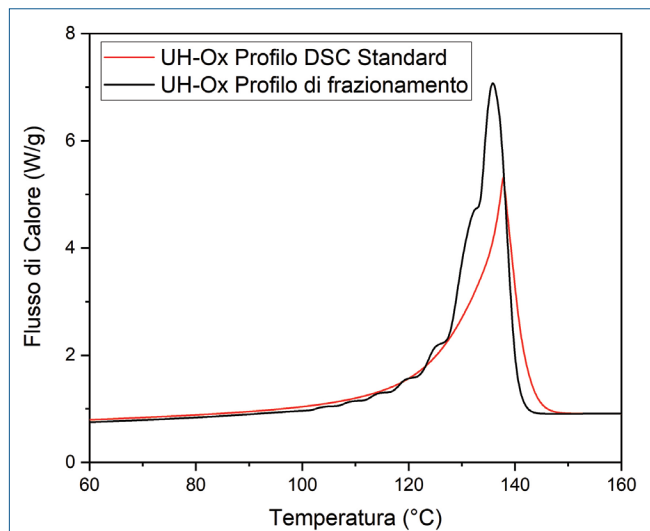


Fig. 1 - Confronto tra il profilo di frazionamento del campione vergine ossidato e il corrispettivo profilo DSC standard

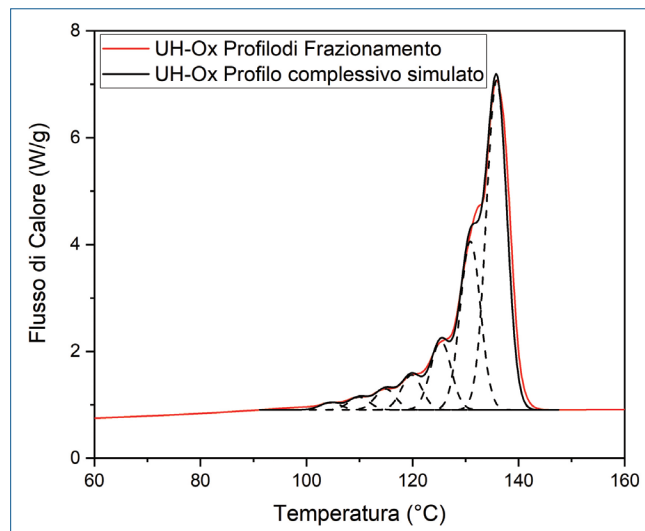


Fig. 2 - Risultato dell'operazione di deconvoluzione sul termogramma del campione UH-Ox

ling, al materiale ossidato a seguito di invecchiamento o ancora additivato con  $\alpha$ -tocoferolo.

A titolo di esempio, nel seguito verranno descritti i risultati ottenuti nello studio degli effetti della degradazione ossidativa sulla struttura polimerica. Conformemente alla procedura suggerita in letteratura [4], la definizione del protocollo è stata preceduta da un esperimento di self-nucleation condotto sul campione a più alta temperatura di fusione, con l'obiettivo di determinare la  $T_{s,ideal}$ , ovvero la minima temperatura che causa la massima auto-nucleazione senza che si verifichi il fenomeno di *annealing*. Il conseguente protocollo termico si è articolato in

9 cicli sequenziali a partire dalla  $T_{s,ideal}$ , previa cancellazione della storia termica del campione, con un tempo di mantenimento in condizioni isoterme a ogni stadio pari a 5 minuti.

I profili termici ottenuti, nettamente differenti rispetto ai profili DSC standard (Fig. 1), mostrano diversi picchi, corrispondenti alla fusione di diverse frazioni cristalline: otto per i materiali più altofondenti e sette per i materiali con temperatura di fusione inferiore.

La successiva deconvoluzione matematica dei termogrammi (Fig. 2) ha permesso di ricavare valutazioni quantitative sulle abbondanze relative delle

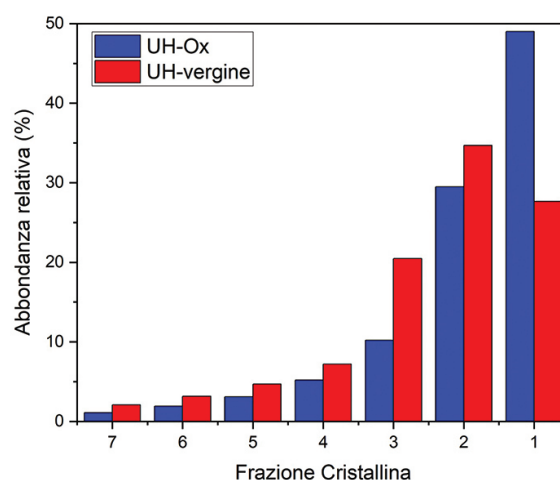
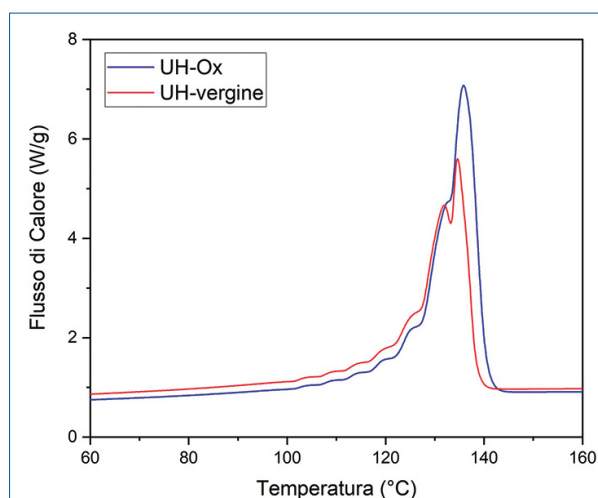


Fig. 3 - Confronto dei profili di frazionamento e delle relative abbondanze cristalline per il campione vergine e per quello ossidato



diverse frazioni cristalline e sull'effetto dei trattamenti a cui i materiali sono stati sottoposti.

L'effetto della degradazione ossidativa è direttamente osservabile nel profilo di frazionamento termico, che risulta visibilmente modificato rispetto a quello del campione vergine di riferimento (Fig. 3). L'ossidazione induce scissioni di catena, riducendo la lunghezza delle macromolecole e favorendone l'organizzazione ordinata, con un effetto marcato principalmente sulla quantità di fase cristallina sviluppabile. Il materiale ossidato presenta una maggiore abbondanza della frazione cristallina 1, localizzata, inoltre, ad una temperatura di fusione più elevata. Tale comportamento è indicativo della formazione di cristalliti di dimensioni maggiori, coerentemente con le modifiche morfologiche indotte dalla degradazione ossidativa.

In conclusione, la SSA si è rivelata efficace nel discriminare le diverse formulazioni di UHMWPE in uso nel settore biomedicale, evidenziando l'impatto dei diversi trattamenti e dei fenomeni di degradazione. Questa tecnica si propone, quindi, come un uti-

le strumento di caratterizzazione in grado di fornire preziose informazioni sull'UHMWPE biomedicale

#### BIBLIOGRAFIA

- [1] P. Bracco, A. Bellare *et al.*, *Materials*, MDPI, 2017, **10**, 791.
- [2] P. Bracco, V. Brunella *et al.*, *Polym. Degrad. Stab.*, 2007, **92**(12), 2155.
- [3] A.J. Müller, R.M. Michell *et al.*, *European Polymer Journal*, 2015, **65**, 132.
- [4] A.J. Muller, Z.H. Hernandez *et al.*, *Polymer Bulletin*, 1997, **39**, 465.

#### Thermal Study of Biomedical UHMWPE

The research that earned me the "Best Master's Thesis Award 2025" from the Industrial Chemistry Division focused on developing and applying a Successive Self-Nucleation and Annealing protocol to medical-grade UHMWPE, achieving, for the first time, its thermal fractionation and generating valuable data for medical use.

**NUOVA  
ENERGIA PER LA  
TUA AZIENDA**



CONCESSIONARIA DI PUBBLICITÀ PER QUESTA RIVISTA  
[www.agicom.it](http://www.agicom.it)







# SENSORI SMART: POLIMERI MECCANOCROMICI

**Questo lavoro affronta lo sviluppo di materiali polimerici meccanocromici, integranti fluorofori aggregacromici come sonde cromatiche sensibili alle deformazioni meccaniche. L'incorporazione dei fluorofori nei polimeri è avvenuta per: (i) innesto covalente su oligomeri di polipropilene isotattico da pirolisi (iPP) e (ii) per polimerizzazione ad apertura di anello (ROP) di macrolattoni ciclici.**

## Introduzione

Il presente lavoro di ricerca, che ha ricevuto il premio 'Giorgio Squinzi' come "Miglior Tesi di Laurea Magistrale" per il 2025, dalla Divisione di Chimica Industriale della SCI, si è focalizzato sulla sintesi e lo sviluppo di nuovi materiali polimerici intelligenti, capaci di rispondere con variazioni cromatiche a stimoli meccanici esterni. La ricerca, si è concentrata su l'impiego di due molecole organiche, un derivato del pirene e una perilene diimide (PDI), caratterizzate da spiccata fluorescenza.

Lo studio delle deformazioni meccaniche a cui sono sottoposti i materiali polimerici è di fondamentale rilevanza nei settori della prevenzione e della diagnosi dei danni derivanti dalle sollecitazioni durante l'intero ciclo di vita del materiale. In tal senso, l'opportunità di sviluppare materiali che, a seguito di deformazioni o sollecitazioni meccaniche, siano in grado di fornire risposte cromatiche facilmente identificabili riveste un notevole interesse nel campo degli imballaggi intelligenti [1].

La proprietà di questi materiali, di variare il loro assorbimento e/o l'emissione, viene definita meccanocromismo e li rende particolarmente versatili come sistemi *smart*; ovvero, capaci di reagire a stimoli esterni. Tra le soluzioni proposte, la funzionalizza-

zione chimica con opportuni fluorofori si è rivelata la metodologia più efficace rispetto alla dispersione fisica di pigmenti in matrici polimeriche. In particolare, sono stati scelti fluorofori aggregacromici, per via della loro facile sintesi e delle eccellenti risposte cromatiche, il cui meccanismo d'azione si basa sulla capacità di aggregarsi all'interno della matrice polimerica [2].

## Upcycling di iPP

Nel primo caso, il derivato di pirene è stato covalentemente legato a degli oligomeri telechelici di iPP. Per la sintesi degli oligomeri telechelici di iPP si è optato per un approccio *top-down*. Mediante reazioni di pirolisi a bassa temperatura di iPP commerciale è possibile ottenere in modo rapido, economico e semplice degli oligomeri con doppi legami alle estremità della catena [3]. Oltre ai precedenti vantaggi, questa via risulta di notevole interesse oggi, poiché integra aspetti sostenibili, come il riciclo chimico delle poliolefine, con la produzione di sistemi ad elevato valore aggiunto, in piena ottica di *upcycling*.

Dapprima è stata effettuata un'ottimizzazione delle condizioni di processo della pirolisi in *batch*; il cui obiettivo era ottenere un prodotto che avesse una

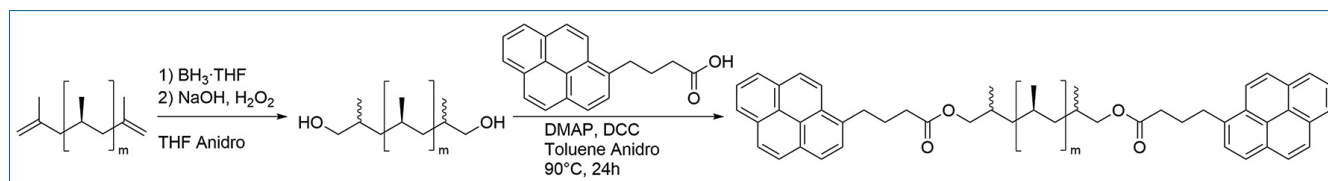


Fig. 1 - Schema di reazione per la funzionalizzazione degli oligomeri di iPP con l'acido 1-pirenebutirrico

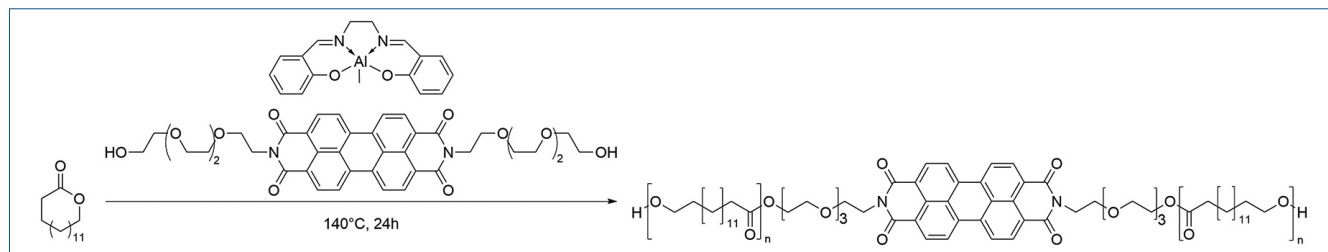


Fig. 2 - Schema di reazione per la ROP del PDL con Pery-PEG-OH come iniziatore

composizione omogenea, un numero elevato di funzionalità olefiniche e le cui condizioni di reazione fossero tali da facilitarne lo *scale-up* in reattori in continuo. Sulla base dei risultati ottenuti, le condizioni di reazione prescelte prevedevano una temperatura di 390 °C, pressione atmosferica di N<sub>2</sub> e un tempo di reazione di 30 minuti. Gli oligomeri così ottenuti sono stati funzionalizzati secondo lo schema di reazione riportato in Fig. 1, che prevedeva una prima reazione di idroborazione-ossidazione seguita dall'esterificazione con l'acido 1-pirenebutirrico [4, 5]; entrambe effettuate con conversioni superiori all'85%.

In successivi studi, la sonda cromatica ottenuta è stata dispersa fisicamente in diverse matrici polimeriche a differenti concentrazioni in peso, ed è stato possibile investigarne il comportamento sotto l'azione della deformazione meccanica. Di particolare interesse sono i risultati ottenuti per la matrice a base di poliolefine elastomeriche (POE), nella quale la separazione di fase tra la sonda cromatica e la matrice polimerica permette di evidenziare in modo efficace i fenomeni di cavitazione indotti dalle deformazioni meccaniche [6].

### Poliesteri PE-like

Nel secondo caso, una molecola di perilene diimide bifunzionale opportunamente sintetizzata è stata impiegata come iniziatore per la ROP del pentadecalattone. Questo estere ciclico viene facilmente polimerizzato impiegando catalizzatori di tipo Salen che portano alla sintesi del polipentadecalattone, un poliestere con proprietà termo-meccaniche comparabili alle comuni poliolefine; tanto da essere definito un materiale *PE-like* [7]. Questo approccio di sintesi di tipo *bottom-up* (Fig. 2) consente l'innesto del fluoroforo al centro della catena polimerica.

Utilizzando un catalizzatore Salen-1, sono state eseguite due reazioni di polimerizzazione a differenti rapporti molari, valutando l'efficacia del derivato di perilene diimide (Pery-PEG-OH) come iniziatore della ROP.

In entrambe le prove, è stato ottenuto un polimero ad elevato peso molecolare con conversioni superiori al 93%. I pesi molecolari medi numerali dell'ordine degli 80 kg/mol e la cristallinità di circa il 50%, sono del tutto comparabili con quelli ricavati facendo uso di iniziatori a basso peso molecolare, quali l'alcol benzilico.

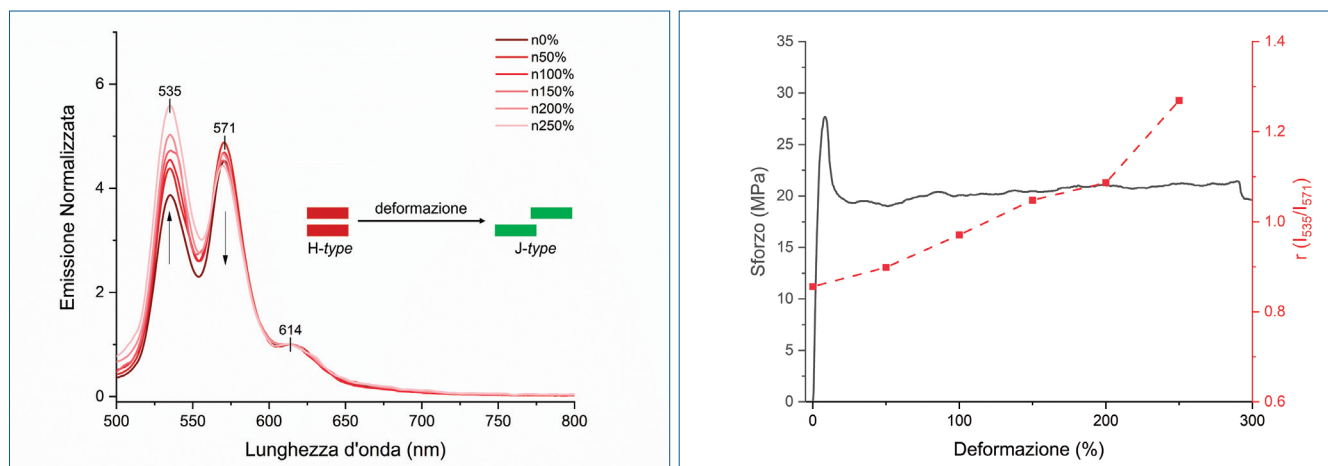


Fig. 3 - a) Spettri di emissione fluorescente del PPDL-2-perilene a differenti valori di deformazione (normalizzati a 614 nm); b) rapporto di intensità ( $r$ ) tra le bande di emissione (535 nm/571 nm) e curva sforzo-deformazione

L'analisi degli spettri di fluorescenza di questi polimeri ha mostrato solo le due bande tipiche dei derivati del PDI in forma isolata o debolmente aggregata. La prima a 535 nm per la transizione  $E^{0-0}$  e la seconda a 571 nm per la transizione  $E^{1-0}$  (Fig. 3a) [8]. Tuttavia, sebbene sia assente la banda associata alla formazione degli aggregati eccimerici intorno a 625-650 nm, si è riscontrata una variazione del rapporto d'intensità tra le due bande di emissione in funzione della deformazione del provino (Fig. 3b). Questo fenomeno è dovuto alla variazione del tipo di aggregati all'interno del materiale sotto l'effetto dello sforzo meccanico, che passano da aggregati H-type a J-type a seguito della disposizione delle catene macromolecolari lungo la direzione di deformazione [9]. In conclusione, attraverso un approccio di *upcycling* a partire da iPP, è stata sviluppata una sonda cromatica in grado di evidenziare i fenomeni di cavitazione

in miscele caratterizzate da segregazione di fase; inoltre, è stato dimostrato il potenziale applicativo dei sistemi ibridi poliestere-perilene.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] H. Traeger *et al.*, *Macromol. Rapid Commun.*, 2021, **42**, 1.
- [2] F. Ciardelli *et al.*, *Chem. Soc. Rev.*, 2013, **42**, 857.
- [3] A.N. Le *et al.*, *Macromolecules*, 2025, **58**, 8360.
- [4] T. Hagiwara *et al.*, *Macromolecules*, 2005, **38**, 10373.
- [5] M. Oggioni *et al.*, *Soft Matter*, 2024, **20**, 2126.
- [6] B. Bertoncini, G. Bancalà *et al.* [Submitted]
- [7] M.P.F. Pepels *et al.*, *Macromolecules*, 2016, **49**, 796.
- [8] C. Micheletti *et al.*, *ACS Appl. Polym. Mater.*, 2024, **6**, 6572.
- [9] A. Oleson *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, 2019, **123**, 20567.

### Smart Sensors: Mechanochromic Polymers

This work deals with the development of mechanochromic polymeric materials incorporating aggregachromic fluorophores as colour probes sensitive to mechanical deformation. The incorporation of fluorophores into polymers was achieved by: (i) covalent bonding to pyrolysed isotactic polypropylene (iPP) oligomers and (ii) ring-opening polymerisation (ROP) of cyclic macrolactones.

## Chemistry Europe Fact Sheet

16 chemical societies, 15 European countries.

Family of high-quality scholarly chemistry journals, covering a very broad range of disciplines.

Evaluate, publish, disseminate, and amplify the scientific excellence of chemistry researchers from around the globe in high-quality publications.

Hub:  
[www.chemistry-europe.org](http://www.chemistry-europe.org)

Societies:  
[www.chemistryviews.org/chemistry-europe-member-societies/](http://www.chemistryviews.org/chemistry-europe-member-societies/)

Association

Mission

**ChemistryViews**

What is happening in the global chemistry community

[www.chemistryviews.org](http://www.chemistryviews.org)

3 per year, free

Newsletter



**Chemistry Europe**

Science news magazine

[www.chemistryviews.org/register/](http://www.chemistryviews.org/register/)

Fellows Program

Award

Recognizes members for their outstanding achievements.

[www.chemistryviews.org/fellows/](http://www.chemistryviews.org/fellows/)

Recognizes outstanding contributions to chemistry.

[www.chemistryviews.org/chemistryeuropeaward/](http://www.chemistryviews.org/chemistryeuropeaward/)

@ChemEurope

Hub:  
[www.chemistry-europe.org](http://www.chemistry-europe.org)

[linkedin.com/company/chemeurope/](https://www.linkedin.com/company/chemeurope/)





# APPROCCI MODERNI NELLA SINTESI ORGANICA

*La ricerca che ho sviluppato negli ultimi anni, e che mi ha portato al conferimento del premio “Chimica organica nei suoi aspetti metodologici 2025”, assegnato dalla Divisione di Chimica organica della SCI, ha riguardato nuove metodologie sostenibili per la sintesi di amminoacidi non proteinogenici e prodotti di interesse per la chimica di bulk dove le tecniche NMR sono state impiegate per studiare il meccanismo di azione e disattivazione dei catalizzatori eterogenei.*

L'attività di ricerca per la quale ho ricevuto il premio “Chimica organica nei suoi aspetti metodologici” si è focalizzata sullo sviluppo di nuove metodologie di sintesi per accedere a molecole che rientrano nella categoria degli amminoacidi non proteinogenici e sull'uso di tecniche analitiche avanzate, in particolare la Risonanza Magnetica Nucleare (NMR), per svelare i meccanismi e i fattori critici che governano la reattività nei sistemi catalitici eterogenei. Quest'ultimo approccio ha ricadute prevalentemente nello sviluppo di metodologie di interesse per la chimica di bulk. In generale, tali studi condotti in collaborazione con gruppi di ricerca multidisciplinari mirano a risolvere alcune sfide nella chimica di sintesi. Un aspetto centrale della mia ricerca riguarda l'applicazione di misure NMR di rilassamento e che vanno ad indagare processi di diffusione per la caratterizzazione *in situ* dei catalizzatori eterogenei. Questa metodologia si è dimostrata cruciale per comprendere i fenomeni che influenzano l'attività e la stabilità del catalizzatore, andando oltre la semplice misurazione delle prestazioni. Abbiamo utilizzato le misure del rapporto  $T_1/T_2$  (costanti che indicano i due principali processi di rilassamento degli spin all'NMR) come un indicatore robusto della forza di interazione tra le molecole (solventi, reagenti etc.) e la superficie porosa del catalizzatore. Questo approccio è stato applicato a diversi sistemi. Un esempio è stato quello di studiare la formazione di umine che si depositano quando si impiega un catalizzatore eterogeneo acido (SBA-15-*pr*-SO<sub>3</sub>H) nell'alcolisi del furfuril alcol (FOL) ad etil levulinato (EL) (Fig.

1A) [1]. Grazie alle misure NMR abbiamo dimostrato che la disattivazione del suddetto catalizzatore non

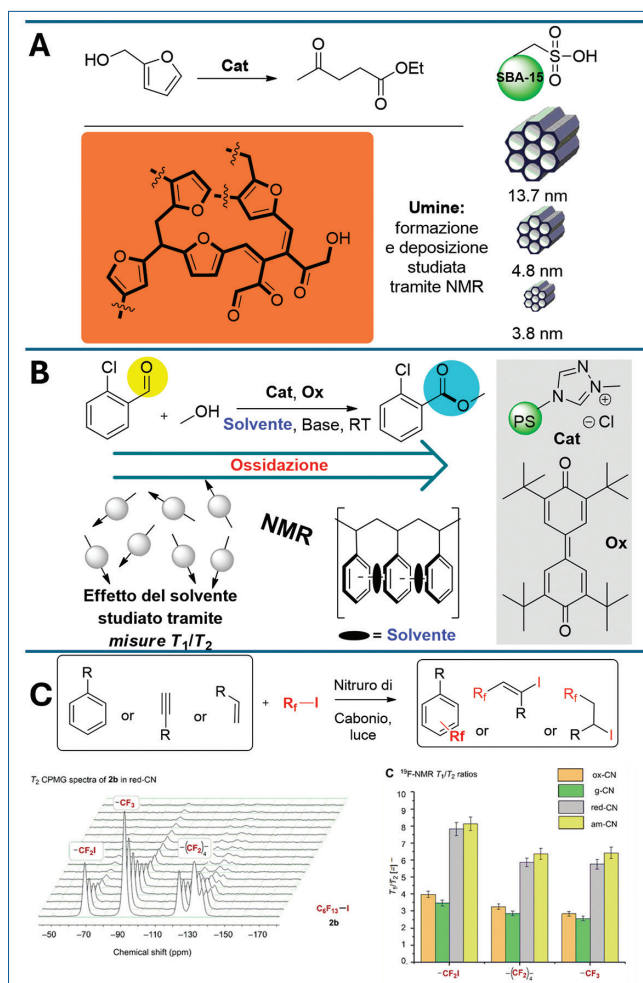


Fig. 1

è dovuta al leaching del gruppo attivo (*pr*-SO<sub>3</sub>H), ma principalmente alla deposizione di umine (sottoprodotti carboniosi) sulla superficie del catalizzatore. Inoltre, abbiamo osservato che nei catalizzatori con pori più piccoli, la deposizione delle umine blocca completamente i pori e le molecole nel mezzo di reazione diffondono sulla superficie, mentre nei catalizzatori con pori intermedi e grandi questo non si osserva. Inoltre, abbiamo anche osservato che la superficie totale accresce la lipofilità in questi ultimi. Lo stesso approccio è stato applicato per studiare l'effetto del solvente nell'accoppiamento ossidativo di aldeidi con alcoli, promosso da un carbene *N*-eterociclico (NHC) supportato su polistirene (Fig. 1B) [2]. I valori di  $T_1/T_2$  hanno stabilito una correlazione diretta; i solventi con maggiore affinità superficiale per la matrice idrofobica del catalizzatore (es. cicloesano, toluene) mostrano un rapporto  $T_1/T_2$  più alto e, di conseguenza, inibiscono maggiormente l'attività catalitica, bloccando l'accesso ai siti attivi da parte dei reagenti. Infine, abbiamo esteso la metodologia ad altri nuclei; in particolare ad altri nuclei attivi abbondanti come il fluoro <sup>19</sup>F. Gli esperimenti all'NMR di quest'ultimo sono stati impiegati per stimare l'interazione di *halogen bonding* tra ioduri perfluoroalchilici e la superficie di nitruri di carbonio modificati (carbon nitriles), poi impegnati come fotocatalizzatori (Fig. 1C). Questo ha permesso di stabilire come l'affinità superficiale del reagente perfluorurato sia un fattore critico che incide sulla reattività del processo fotocatalizzato [3].

Nell'ambito di ideare ed ottimizzare metodologie per la sintesi di prodotti di grande interesse pratico mi sono concentrato da alcuni anni a questa parte sulla messa a punto di metodiche innovative e sostenibili per la sintesi di amminoacidi non proteinogenici (NPAAs). Questo rappresenta un campo di ricerca fondamentale, specialmente per l'industria farmaceutica, dato il loro ruolo come componenti di peptidi terapeutici. I miei lavori hanno descritto diverse strategie fotocatalitiche e organocatalitiche, spesso implementate in flusso continuo per massimizzare la sostenibilità, per accedere a librerie di NPAAs funzionalizzati. In due lavori è stato sfruttato l'accoppiamento Cross-Deidrogenativo (CDC) come strategia sintetica che consente la modifica diretta dei derivati della glicina in posizione  $\alpha$  mediante l'attivazione ossidativa di legami C-H. In un primo lavoro il

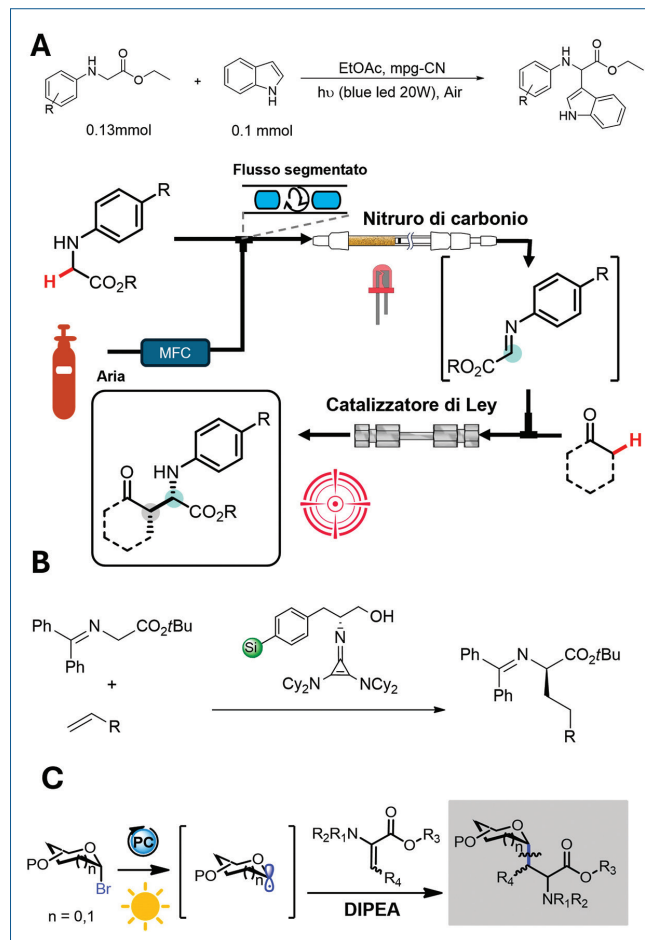


Fig. 2

nitrato di carbonio grafítico mesoporoso (mpg-CN) è stato impiegato come fotocatalizzatore per la trasformazione selettiva di *N*-aril glicine in un'immina elettrofila, seguita da alchilazione di Friedel-Crafts con l'indolo *in situ* [4].

In un lavoro successivo il CDC è stato accoppiato ad una reazione di Mannich ed il processo è stato implementato in flusso continuo. Per ottenere NPAAs enantiopuri è stata progettata una reazione telescopica (che aumenta la sostenibilità del processo andando a bypassare fasi intermedie di purificazione) in flusso continuo. Il protocollo consiste in due reazioni consecutive: 1) fotoossidazione del derivato della glicina (C-H attivazione) ad immina elettrofila, seguita da 2) una reazione di Mannich enantioselectiva con chetoni o aldeidi  $\alpha$ -enolizzabili (Fig. 2A) [5]. Sono stati preparati due reattori impaccati da catalizzatori eterogenei quali l'mpg-CN per l'ossidazione, ed il catalizzatore di Ley (un derivato della pro-



lina) supportato su silice SBA-15 per la reazione di Mannich. Qui il sistema ha dimostrato stabilità a lungo termine, operando per almeno 9 cicli, previo lavaggio ogni 16 ore, con una produttività cumulativa di 1,8 g del prodotto benchmark. L'eterogenizzazione degli organocatalizzatori rappresenta da diversi anni un interessante approccio per arginare il basso TON che affligge questa classe di catalizzatori. Tra gli organocatalizzatori le superbasi ciclopropenimminiche bifunzionali rappresentano degli ottimi attivatori di metileni non reattivi, anche se appartenenti alla categoria dei carbonili/carbossili  $\alpha$ -enolizzabili. Qui è stata studiata e ottimizzata una strategia di immobilizzazione su supporti di polistirene e silice amorfa che poi sono stati impiegati nella reazione di Michael impiegando glicinimmine come pro-nucleofili  $\alpha$ -enolizzabili (Fig. 2B) [6]. La silice ha dimostrato una stabilità superiore, consentendo la riciclabilità per 5 cicli senza significativa disattivazione (con un TON cumulativo di 27), a differenza della controparte in polistirene, la cui efficienza diminuiva dopo il primo ciclo. In fine, volendo esplorare delle metodologie per la preparazione di NPAAAs che rientrassero nella categoria dei glicoconjugati, è stata sviluppata una strategia fotocatalizzata modulabile per la sintesi di analoghi di  $\alpha$ -C-glicosil alanine, una classe di glicoconjugati ad alto valore aggiunto. Di base si tratta di una reazione di Giese  $\alpha$ -selettiva tra bromuri piranosilici/furanosilici (donatori di radicali C-glicosilici) e degli analoghi della deidroalanina [7]. Per promuovere la reazione di Giese sono stati proposti due protocolli catalitici in base al substrato, il classico complesso di rutenio(II), il Ru(bpy)<sub>3</sub>, viene utilizzato quando il complesso di rame(I) fallisce a causa di un'inibizione promossa dal substrato. Il complesso di rame(I) impiegato, il [(DPEPhos)(bcp)Cu]PF<sub>6</sub>, rientra in una nuova generazione di complessi del rame(I). Inoltre, in questo lavoro gli studi meccanicistici hanno rivelato che la formazione del radicale C-glicosilico avviene anche tramite un processo di trasferimento dell'atomo di alogeno (XAT), che opera in parallelo con il meccanismo di trasferimento di singolo elettrone (SET). L'uso di *N,N*-diisopropiletilammina (DIPEA) come riducente è cruciale, poiché il radicale  $\alpha$ -amminoalchilico generato da DIPEA può efficientemente estrarre l'atomo di bromo (XAT) dal bromuro alchilico, generando l'intermedio radicalico chiave (Fig. 2C).

In conclusione, la mia attività di ricerca ambisce allo sviluppo di nuovi sistemi catalitici e di nuove metodologie sintetiche da impiegare per processi atti all'ottenimento di prodotti di interesse principalmente farmaceutico e per la chimica di bulk. Il ricorso a fotocatalizzatori e organocatalizzatori si pone decisamente molto bene in tale contesto; inoltre, viene sempre presa in considerazione la parte di studio che si concentra sui meccanismi di azione di tali catalizzatori.

### Ringraziamenti

Desidero ringraziare sentitamente per il riconoscimento assegnatomi il Direttivo della Divisione di Chimica organica. Vorrei anche ringraziare i miei mentori, ovvero tutti professori che mi hanno fatto crescere scientificamente e professionalmente. Un ringraziamento alla prof.ssa Olga Bortolini, al prof. Alessandro Massi, al prof. Carmine D'Agostino ed al prof. Luca Bernardi.

### Bibliografia

- [1] G. Di Carmine, C. Leonardi *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023, **15**, 24528.
- [2] G. Di Carmine, D. Ragno *et al.*, *Org. Lett.*, 2020, **22**, 4927.
- [3] G. Filippini, F. Longobardo *et al.*, *Sci. Adv.*, 2020, **6**(46), eabc9923.
- [4] L. Poletti, D. Ragno *et al.*, *J. Org. Chem.*, 2022, **87**, 7826.
- [5] L. Poletti, N. Codecà *et al.*, *ACS Sustain. Chem. Eng.*, 2024, **12**, 15193.
- [6] C. Leonardi, A. Brandolese *et al.*, *Adv. Synth. Catal.*, 2021, **363**, 5473.
- [7] L. Poletti, A. Massi *et al.*, *Org. Lett.*, 2023, **25**, 4862.

### Modern Approaches in Organic Synthesis

The research I have developed in recent years, which led to the awarding of the prize "Organic Chemistry in its Methodological Aspects," focused on new sustainable methodologies for the synthesis of non-proteinogenic amino acids and products relevant to bulk chemistry, where NMR techniques were employed to investigate the mechanisms of action and deactivation of heterogeneous catalysts.





## INNOVAZIONE NELL'ELETTROSINTESI ORGANICA

*Sin dalla nascita della chimica, l'utilizzo dell'elettricità come mezzo per condurre reazioni ha ispirato numerose generazioni di scienziati. Recentemente, lo sviluppo tecnologico ha riportato all'attenzione della comunità scientifica la sua applicazione nella chimica organica. In questo articolo vengono considerati i progressi che hanno reso l'elettrosintesi organica innovativa e appetibile.*

### Introduzione

L'utilizzo dell'elettricità come mezzo per fornire l'energia necessaria alla costruzione di nuove molecole ha da sempre affascinato i chimici di ogni era. I contributi di Kolbe [1] e Faraday [2] nell'applicazione dell'elettrochimica riflettono tale originale aspirazione, che contribuì incisivamente all'evoluzione storica della chimica come la conosciamo oggi. In particolare, l'elettrochimica applicata alla sintesi organica ha suscitato notevole interesse, inizialmente per la maniera non convenzionale con cui le molecole reagivano e, in seguito, per le opportunità di ottenere risultati divergenti dalla tradizionale chimica termica. Con il passare delle decadi, la branca dell'elettrosintesi organica si è sempre più ampliata, arrivando a un picco tra gli anni Settanta e Ottanta. Tuttavia, la scarsità di materiali standardizzati, assieme alla manchevole unificazione del design delle celle elettrolitiche, interruppe bruscamente il progresso di quello che, fino a quel momento, era considerato uno dei rami più promettenti nell'ambito della sintesi. I recenti sviluppi nel controllo e nella comprensione della chimica dei radicali, assieme all'avvento di celle elettrolitiche commercialmente disponibili e di facile utilizzo, ha riacceso l'interesse per una tecnologia che era stata quasi dimenticata [3]. Questo nuovo impulso ha riportato in auge l'elettrosintesi organica, proiettandola verso un nuovo futuro di infinite possibilità.

Tra le più convincenti motivazioni che hanno reso l'innovazione elettrochimica appetibile spiccano le

semplici e blande condizioni di reazione, l'opportunità di sostituire reagenti ossidoriduttivi tossici o pericolosi con gli elettroni derivanti dalla corrente, e la facile scalabilità di questi protocolli, data la grande disponibilità dei reattori elettrochimici a larga scala, spesso impiegati per altri utilizzi [4]. Questi fattori rendono l'elettrosintesi organica sostenibile e interessante dal punto di vista della ricerca, aprendo gli orizzonti a nuove frontiere di reattività finora non esplorate. L'elettrochimica, assieme ad altre tecnologie come la chimica in flusso, hanno reso possibile l'investigazione di aree precedentemente inaccessibili, con il conseguente sviluppo di tecniche per ovviare a limitazioni nella piccola (<1 mg) e grande (>10 kg) scala.

### Elettrosintesi organica: selezione della cella elettrolitica per diverse applicazioni

Nella valutazione delle tipiche iterazioni per la preparazione di composti di interesse farmaceutico e agrochimico, la possibilità di condurre reazioni in maniera versatile da regimi molto bassi fino a produzioni massive risulta una componente essenziale nello sviluppo di una tecnologia sintetica. Nel caso dell'elettrosintesi organica, l'utilizzo di celle specificamente progettate per determinati settori risulta fondamentale per il successo di ogni stadio sintetico (Fig. 1).

L'utilizzo di ridotte quantità di reagenti, tipico di sperimentazioni ad alto rendimento (*High Throughput Experimentation*) risulta molto complesso

A Gabriele Laudadio è stato conferito il premio "Chimica organica per l'ambiente, l'energia e le nanos scienze 2025" dalla Divisione di Chimica Organica della SCI.

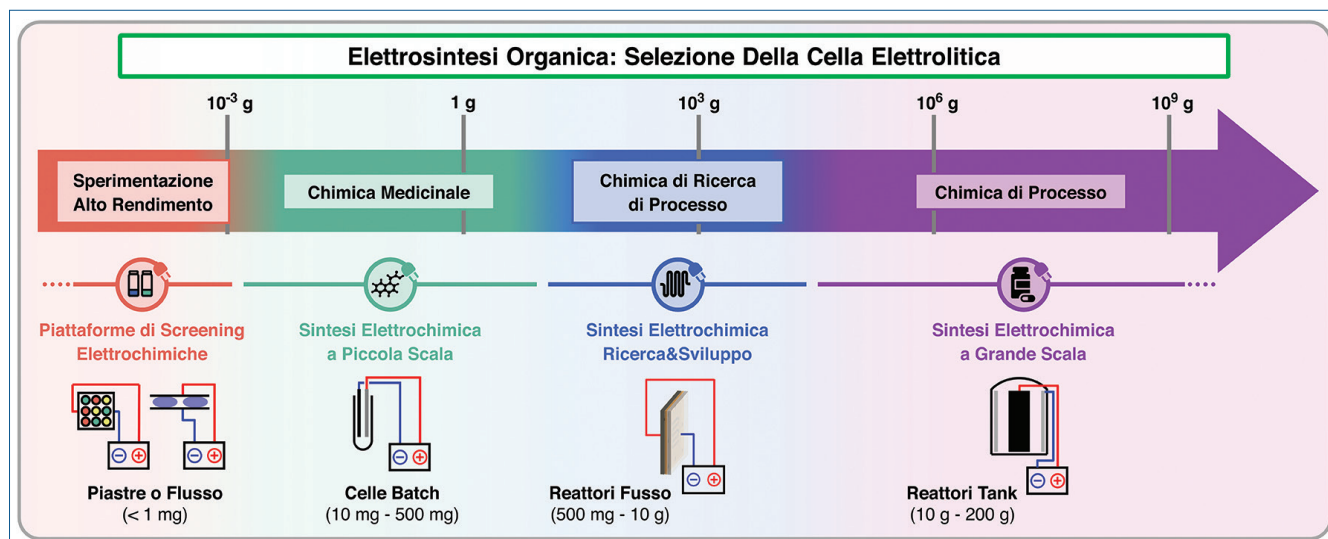


Fig. 1 - Suddivisione delle diverse aree di interesse per l'esecuzione di reazioni elettrochimiche in sintesi organica. A diversi regimi e applicazioni corrispondono differenti celle elettrochimiche che possono essere utilizzate di diversa provenienza geografica

da un punto di vista ingegneristico. La miniaturizzazione degli elettrodi compromette i sistemi elettrolitici in termini di riproducibilità praticabilità. Tra le varie soluzioni sviluppate, l'utilizzo di elettrodi 'wireless' attivati da fotoni sembrano ovviare al tedioso problema [5].

In alternativa, l'impiego di reattori a flusso continuo con ridotti volumi ( $<100 \mu\text{L}$ ) possiede numerosi vantaggi in termini di praticabilità e accumulo dati, in quanto differenti miscele di reazione possono essere iniettate in poco tempo, generando un cospicuo quantitativo di informazioni. Inoltre, suddetti sistemi ben si prestano ad essere automatizzati, garantendo un costante e versatile sistema elettrochimico [6]. In questo contesto, il nostro gruppo di ricerca ha sviluppato piattaforme elettrochimiche automatizzate per la generazione di librerie di frammenti PROTAC mediante elettrocatalisi di nichel e per l'ottimizzazione automatizzata di diverse reazioni algoritmi specifici (*Bayesian Optimization algorithm*) [7, 8].

Nell'elaborazione di nuove metodologie di sintesi, utili nel contesto della chimica medicinale, si tende a testare reazioni in piccole scale sufficienti a isolare i prodotti desiderati. In elettrochimica, tale pratica viene condotta oggi giorno mediante celle commerciali che garantiscono alta riproducibilità su scale dai 10 ai 500 mg [9]. In questo modo, le reazioni possono essere ottimizzate in maniera classica, minimizzando il consumo dei reagenti.

Nel nostro gruppo, reazioni come l'idroformilazione di alcheni tramite attivazione radicalica della dimetilformammide sono state eseguite secondo questo approccio [10].

A seguito di queste metodologie, in contesti industriali le reazioni vengono eseguite su quantitativi maggiori per facilitare l'accumulo di materiali utili nei test biologici. Per eseguire questo *scale-up*, in elettrochimica vengono utilizzati reattori a flusso continuo a piastre parallele. In questo modo, le condizioni di reazione restano costanti e possono essere condotte per lungo tempo, accumulando materiale in maniera controllata, grazie al migliore trasporto di massa tipico di questa soluzione ingegneristica [11]. Nel nostro laboratorio, tale strategia è stata adottata nella sintesi di un frammento del farmaco Delamanid, utilizzato nel trattamento contro la tubercolosi [12].

Infine, la produzione massiva di composti mediante elettrochimica viene generalmente condotta in reattori tank, dove spesso la miscela di reazione viene spostata in multiple celle tramite pompe idrauliche [4].

### Conclusioni

In conclusione, l'elettrosintesi organica ricopre oggi giorno un ruolo rilevante nella scoperta di nuove reazioni e nella sostituzione di metodi tradizionali poco sostenibili, accelerando la transizione *green* della ricerca chimica sia in ambito accademico

che industriale. Il compimento di questo ambizioso progetto passa dalla accurata selezione degli appropriati reattori a seconda dell'applicazione desiderata, facilitando l'impiego della tecnologia elettrochimica a tutte le scale.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] W.B. Smith, H.-G. Glide, *J. Am. Chem. Soc.*, 1959, **81**, 5325.
- [2] M. Faraday, *Phil. Trans. R. Soc.*, 1832, **122**, 125.
- [3] M. Yan, Y. Kawamata, P.S. Baran, *Chem. Rev.*, 2017, **117**, 13230.
- [4] G. Laudadio, *CHIMIA*, 2025, **79**, 417.
- [5] B. Górski, J. Rein *et al.*, *Nature*, 2025, **637**, 354.
- [6] E. Rial-Rodríguez, C.O. Kappe, G. Laudadio, *Chem. Methods*, 2025, e202500104.
- [7] E. Rial-Rodríguez, J.D. Williams *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, **63**, e202412045.
- [8] E. Rial-Rodríguez, F.L. Wagner *et al.*, *ChemRxiv*, 2025, DOI: **10.26434/chemrxiv-2025-d1z1f**
- [9] M. Yan, Y. Kawamata, P.S. Baran, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2017, **57**, 4149.
- [10] Y. Xi, S. Sharma, C.O. Kappe, G. Laudadio, *ChemRxiv*, 2025, DOI: **10.26434/chemrxiv-2025-526dj**
- [11] T. Noël, Y. Cao, G. Laudadio, *Acc. Chem. Res.*, 2019, **52**, 2858.
- [12] M. Prieschl, D. Cantillo *et al.*, *React. Chem. Eng.*, 2025, **10**, 130.

### Innovation in Synthetic Organic Electrochemistry

In the chemistry field, the use of electricity to conduct chemical reactions has intrigued and inspired numerous generations of chemists. Recently, the technological improvements of materials brought back the attention of the scientific community of its application in organic chemistry. In this article, the reasons behind the renewed interest in synthetic organic electrochemistry are analyzed.

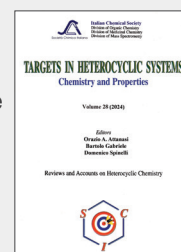
## Libri e riviste Sci

### Targets in Heterocyclic Systems Vol. 28

È disponibile il 28° volume della serie "Targets in Heterocyclic Systems", a cura di Orazio A. Attanasi, Bortolo Gabriele e Domenico Spinelli

[https://www.soc.chim.it/it/libri\\_collane/th/s/vol\\_28\\_2024](https://www.soc.chim.it/it/libri_collane/th/s/vol_28_2024)

Sono disponibili anche i volumi 1-27 della serie.



I seguenti volumi sono a disposizione dei Soci gratuitamente, è richiesto soltanto un contributo spese di € 10:

- G. Scorrano "La Storia della SCI", Edises, Napoli, 2009 (pp. 195)
- G. Scorrano "Chimica un racconto dai manifesti", Canova Edizioni, Treviso, 2009 (pp. 180)
- AA.VV. CnS "La Storia della Chimica" numero speciale, Edizioni SCI, Roma 2007 (pp. 151)
- AA.VV. "Innovazione chimica per l'applicazione del REACH" Edizioni SCI, Milano, 2009 (pp. 64)

Oltre "La Chimica e l'Industria", organo ufficiale della Società Chimica Italiana, e "CnS - La Chimica nella Scuola", organo ufficiale della Divisione di Didattica della SCI ([www.soc.chim.it/riviste/cns/catalogo](http://www.soc.chim.it/riviste/cns/catalogo)), rilevante è la pubblicazione, congiuntamente ad altre Società Chimiche Europee, di riviste scientifiche di alto livello internazionale:

- ChemPubSoc Europe Journal
- Chemistry A European Journal
- EURJOC
- EURJIC
- ChemBioChem
- ChemMedChem
- ChemSusChem
- Chemistry Open
- ChemPubSoc Europe Sister Journals
- Chemistry An Asian Journal
- Asian Journal of Organic Chemistry
- Angewandte Chemie
- Analytical & Bioanalytical Chemistry
- PCCP, Physical Chemistry Chemical Physics

**Per informazioni e ordini telefonare in sede, 06 8549691/8553968, o inviare un messaggio a [segreteria@soc.chim.it](mailto:segreteria@soc.chim.it)**





# INVESTIGAZIONE DELL'INTERAZIONE BRCA2-RAD51

*Il progetto, per cui sono stato insignito del Premio tesi di dottorato della Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici della Società Chimica Italiana, è stato incentrato sull'investigazione dell'interazione BRCA2-RAD51, integrando approcci computazionali e sperimentali.*

Ogni giorno, molteplici fattori endogeni ed esogeni danneggiano il nostro DNA [1]. In particolare, le rotture del doppio filamento di DNA risultano essere tra le lesioni più deleterie, potendo risultare in mutazioni o traslocazioni cromosomali, prodromiche all'insorgenza e allo sviluppo di tumori [2, 3]. Fortunatamente, l'evoluzione ha consentito di sviluppare varie strategie per riparare questi danni [2, 3]. Tra di esse, la ricombinazione omologa, gioca, certamente, un ruolo fondamentale [2, 3]. Infatti, tale meccanismo consente una riparazione del DNA estremamente accurata, dato che, avvenendo nelle fasi S e G2 del ciclo cellulare, può sfruttare il DNA dei cromatidi fratelli come stampo per ricostruire le porzioni di DNA danneggiate [2, 3]. RAD51 e BRCA2 sono due proteine fondamentali per tale processo [2, 3]. RAD51 è una ricombinasi in grado di identificare il DNA omologo sul cromatide fratello, necessario alla riparazione del danno [2, 3]. BRCA2 è invece una proteina di notevoli dimensioni, più di 3000 amminoacidi, che ha il ruolo di orchestrare diversi fattori coinvolti nella ricombinazione omologa tra cui proprio RAD51 [2, 3]. BRCA2 recluta RAD51 nel citosol cellulare e ne favorisce l'accumulo nei siti dove il DNA è danneggiato [2, 3]. In particolare, si è dimostrato come BRCA2 interagisca con RAD51 attraverso una regione composta di otto sequenze ripetute di 35-40 amminoacidi denominate "BRC-repeats" [2, 3]. Curiosamente, una singola mutazione patologica che insorga in una delle otto sequenze dei "BRC-repeats" è sufficiente a bloccare il reclutamento di RAD51 e, conseguentemente, la ricombinazione omologa [2, 3]. In tale situazione, le cellule sono quindi costrette a sfruttare sistemi di ri-

parazione del DNA più imprecisi che contribuiscono all'instabilità cromosomica favorendo così l'insorgenza di tumori ovarici nelle donne [2-4]. Considerata l'alta omologia tra le sequenze amminoacidiche dei "BRC-repeats" è sorprendente come le mutazioni che insorgono all'interno di una sola di esse non possano essere controbilanciate dalle altre sette non mutate [2, 3].

## Obiettivo del progetto

Nonostante, l'interazione tra il peptide BRC4, il quarto "BRC-repeats", e il dominio C-terminale di RAD51 sia già stata caratterizzata dal punto di vista strutturale, molti dettagli dell'interazione tra i "BRC-repeats" e RAD51, non sono ancora chiari [2, 3]. Ad esempio, non è noto quale sia la struttura del complesso della RAD51, completa anche del dominio N-terminale, con BRC4, e se anche tutti gli altri "BRC-repeats" condividano simili modalità di interazione con RAD51. Il mio lavoro di dottorato nasce dall'esigenza di fare luce su questi, ed altri aspetti, non ancora chiari dell'interazione BRCA2-RAD51 integrando metodiche computazionali e sperimentali.

## Depolimerizzazione di RAD51 mediata da BRC4

RAD51 possiede una tendenza intrinseca a formare strutture oligomeriche fibrillari [5]. Tale comportamento è evidente anche in esperimenti di microscopia elettronica effettuati con i campioni di proteina eterologamente espressa in *E. coli* (Fig. 1) [5]. La fase iniziale del mio progetto si è quindi focalizzata sul comprendere come BRC4 interagisse con tali strutture fibrillari [5]. Attraverso esperimenti di microscopia

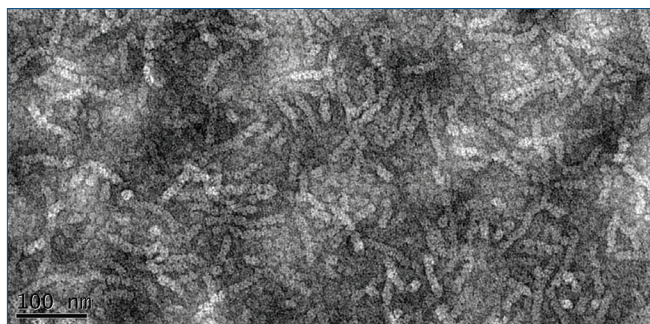


Fig. 1 - Immagine al microscopio elettronico delle fibrille di RAD51

elettronica e cromatografia di esclusione dimensionale è stato quindi possibile osservare che BRC4 depolimerizza le fibrille di RAD51 a partire da un'estremità e non con un attacco randomico sulla fibrilla (Fig. 2) [5].

## Isolamento di una forma monomerica umana di RAD51

Data l'eterogeneità della forma fibrillare di RAD51, essa non è una forma idonea per studi biofisici dell'interazione tra "BRC-repeats" e RAD51 [6]. Pertanto, il secondo obiettivo del mio progetto di dottorato è stato esprimere e purificare una forma monomerica della RAD51 umana [6]. La proteina monomerica isolata è stata, quindi, validata valutandone l'interazione con BRC4 e con un nuovo inibitore dell'interazione BRCA2-RAD51, CAM833 (Fig. 2) [6]. Per otte-

nere informazioni strutturali sulla RAD51 completa in complesso con BRC4, non avendo ottenuto cristalli del complesso peptide-proteina adatti a successivi studi di diffrazione ai raggi X, si sono quindi effettuati esperimenti "Small Angle X-Ray Scattering" (SAXS) [6]. I dati sperimentali ottenuti sono stati integrati con studi computazionali su predizioni di AlphaFold2, evidenziando un'elevata flessibilità del dominio *N*-terminale di RAD51 [6]. Ciò suggerisce che il legame con BRC4 determini una transizione del dominio *N*-terminale ad uno stato più disordinato, fornendoci quindi una spiegazione meccanicistica di come avvenga la depolimerizzazione delle fibrille di RAD51, descritta in precedenza [6].

## Approcci strutturali integrativi per lo studio di complessi RAD51 - "BRC-repeats"

Avendo validato il monomero umano di RAD51 per studi biofisici lo si è quindi sfruttato per valutarne l'interazione con gli altri "BRC-repeats" [7]. Questi esperimenti hanno evidenziato come i primi quattro "BRC-repeats" (BRC1-4) posseggano un'elevata affinità per RAD51, mentre gli ultimi quattro (BRC5-8) mostrino un'affinità di legame scarsa o nulla [7]. Inoltre, si è osservato che solo BRC1-4, aventi l'affinità più alta per la proteina monomerica, siano in grado di disassemblare la forma fibrillare di RAD51 [7]. Per

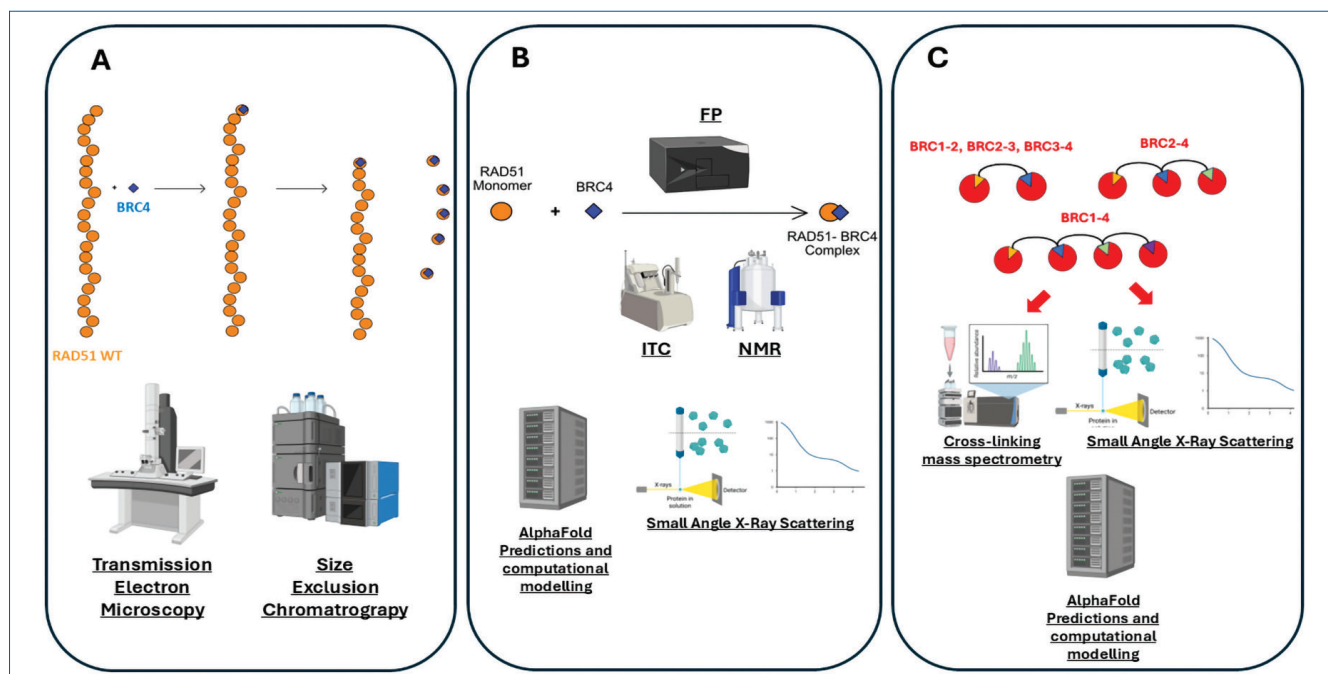


Fig. 2 - Le tre principali direttrici del progetto di dottorato: A) studio della depolimerizzazione di RAD51 mediata da BRC4; B) studi biofisici con forma monomerica umana di RAD51; C) approcci strutturali integrativi per lo studio di complessi RAD51-"BRC-repeats"



razionalizzare questi risultati sono stati effettuati studi computazionali che hanno mostrato come le differenti affinità misurate siano attribuibili a specifiche variazioni amminoacidiche all'interno dei "BRC-repeats" [7]. I risultati computazionali e sperimentali ottenuti hanno, infine, guidato l'ultima parte del progetto, che si è concentrata su espressione e purificazione di RAD51 in complesso con troncature di BRCA2 contenenti alcuni o tutti i BRC1-4, assieme alle loro regioni di connessioni native presenti in BRCA2 [7]. Tali complessi sono stati studiati mediante un approccio strutturale che integrasse metodiche computazionali, studi di spettrometria di massa "cross-linking" (XL-MS) e SAXS (Fig. 2) [7]. I risultati ottenuti non solo hanno fatto luce sul ruolo cruciale dell'interazione dei primi quattro "BRC-repeats" con i domini N-terminali di RAD51, ma anche sul comportamento dinamico e flessibile delle regioni che li collegano [7].

### Ringraziamenti

Desidero ringraziare la SCI per il riconoscimento ricevuto e AIRC per aver sostenuto questo progetto attraverso la borsa di studio Id. 25239. Sono, inoltre, riconoscente ai miei mentori Prof. Andrea Cavalli e Prof. Dario Neri per avermi sempre supportato e motivato nel mio percorso scientifico.

### BIBLIOGRAFIA

- [1] C. Stok *et al.* *Nucleic Acids Res.*, 2021, **49**(9), 4239.
- [2] F. Rinaldi, S. Girotto *Curr. Opin. Struct. Biol.*, 2024, **88**, 102895.
- [3] F. Rinaldi, S. Girotto *Curr. Opin. Struct. Biol.*, 2025, **95**, 103164.
- [4] K.B. Kuchenbaecker *et al.*, *JAMA*, 2017, **317**(23), 2402.
- [5] F. Schipani *et al.*, *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**(15), 8338.
- [6] F. Rinaldi *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2023, **62**(51), e202312517.
- [7] F. Rinaldi *et al.*, *bioRxiv*, 2025, **11**, 13.688182.

### A BRCA2-RAD51 Interaction Investigation

This research project aimed at elucidating the BRCA2-RAD51 interaction integrating computational and experimental approaches. Obtained results offer new mechanistic insights into how BRCA2 recruits RAD51 in the cytosol.

## Istruzioni per gli Autori

La *Chimica e l'Industria* è una rivista di scienza e tecnologia e di informazione per i chimici.

Nella rubrica "Attualità" ospita articoli o comunicati brevi su argomenti di interesse rilevante per tutti coloro che operano nella chimica, richiesti dalla redazione o ricevuti come lettere al direttore.

Nella sezione "Chimica e..." ospita articoli in italiano o in inglese di carattere applicativo, tecnologico e informativo per tutti i settori rilevanti della chimica.

Tutti gli articoli saranno sottoposti al giudizio di almeno un referee.

## Testi

I testi possono essere trasmessi via e-mail con chiara indicazione dei nomi degli autori, scrivendo per esteso anche il nome di battesimo, gli Istituti o Enti presso i quali svolgono la loro attività e relativo indirizzo.

I testi dovranno rispettare le seguenti norme editoriali:

- l'articolo, da inviare in formato word, dovrà essere preferibilmente in italiano; non è necessaria alcuna particolare formattazione;
  - lunghezza totale (compresi riassunto, abstract, riferimenti bibliografici e didascalie delle figure): 16.000 caratteri spazi inclusi (corrispondenti a circa 5 pagine di rivista).
- In particolare:
- il titolo non dovrà essere lungo più di 40 caratteri;
  - l'articolo dovrà essere corredato di un riassunto di 400 caratteri e di un abstract in inglese (con traduzione anche del titolo) della medesima lunghezza;
  - immagini, schemi, figure: gradite almeno 1 per pagina. Le immagini vanno inviate in formato jpg, tiff o gif in file separati. Si raccomanda di uniformare la lingua delle immagini a quella del testo. Si consiglia di inserire anche un'immagine esplicativa da utilizzare in apertura dell'articolo;
  - gli eventuali riferimenti bibliografici (max 30) vanno inseriti in ordine numerico all'interno del testo entro parentesi quadre, posti alla fine del testo e redatti secondo i seguenti esempi:

- [1] D.W. Breck, *Zeolite Molecular Sieves*, J. Wiley, New York, 1974, 320.
- [2] R.D. Shannon, T. Finningan, *Acta Crystallogr.*, 1976, **32**, 751.
- [3] R.P. Mason, S.M. Macdonald *et al.*, *Water Air and Soil Pollution*, 1992, **64**, 617.

Si ricorda che "La Chimica e l'Industria" viene pubblicata esclusivamente online: si consiglia di inserire link a collegamenti esterni da cui poter scaricare eventuale materiale integrativo (immagini, testi, ecc.) a completamento dell'articolo.

Tutto il materiale deve essere inviato per e-mail a:  
dott. Anna Simonini, [anna.simonini@soc.chim.it](mailto:anna.simonini@soc.chim.it)





Antonella Maria Maggio  
Dipartimento STEBICEF  
Università di Palermo  
antonella.maggio@unipa.it

# L'ESTRATTO DI CARNE DI LIEBIG: UN ESEMPIO DI APPLICAZIONE SOCIALE DELLA RICERCA SCIENTIFICA

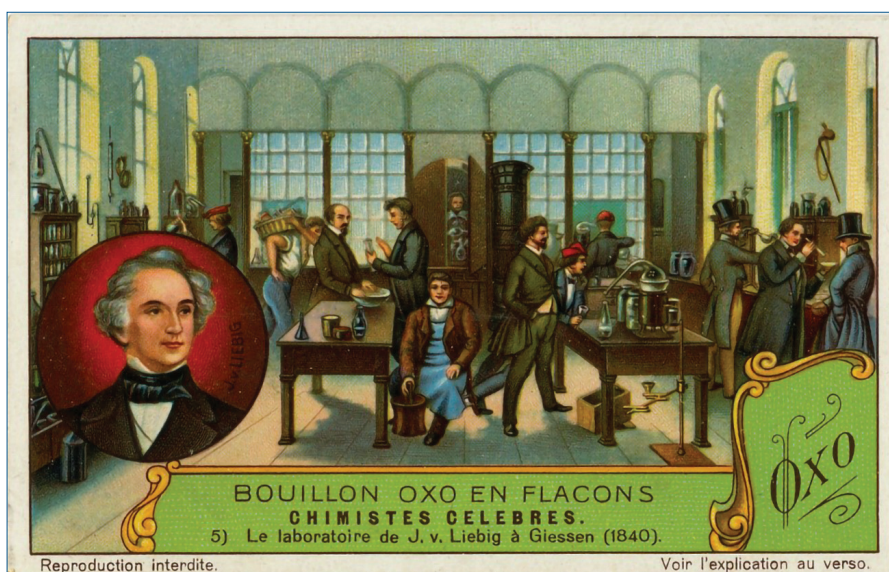
*Il contributo analizza come Justus von Liebig trasformò la chimica in disciplina applicata ai processi vitali, fino alla formulazione dell'estratto di carne. L'approccio quantitativo e sperimentale alla teoria metabolica rese possibili applicazioni industriali innovative, segnando la transizione verso una moderna scienza dell'alimentazione.*

## Introduzione

Justus von Liebig (1803-1873) (Fig. 1) è una figura centrale nella trasformazione della chimica ottocentesca in disciplina moderna, fondata su metodi quantitativi, laboratori didattici e un linguaggio teorico unitario. Formatosi tra Parigi e Giessen (Fig. 2), la sua attività scientifica influenzò profondamente la chimica organica, la fisiologia e l'agricoltura, contribuendo a un'interpretazione dei processi vitali basata su leggi chimiche generali.

Le sue ricerche spaziavano dalla nutrizione delle piante alla fisiologia animale, mostrando come fenomeni quali respirazione, combustione e fertilità dei suoli rispondano a principi comuni. Accanto allo scienziato rigoroso emerge il divulgatore e l'imprenditore capace di tradurre la teoria in applicazioni industriali: tra queste, l'estratto di carne, destinato ad avere un significativo impatto sociale.

Questo contributo, a partire dalla lettura delle *Lettere prime e seconde sulla chimica* [1], ricostruisce i passaggi teorici e sperimentali che condussero alla realizzazione dell'estratto di carne, un prodotto tuttora molto diffuso.



## La fermentazione come metamorfosi chimica

Il confronto che nel 1842 oppose Johann Bernhard Wilbrand (1779-1846) e Justus von Liebig costituì un momento chiave nella definizione del ruolo della chimica nello studio dei processi vitali. Mentre Wilbrand, legato alla *Naturphilosophie* [2], escludeva la chimica dall'indagine sulla vita, Liebig rivendicava l'autonomia della disciplina e la sua capacità di interpretare le trasformazioni biologiche, come espresso in *Animal Chemistry* [3].

In quest'opera, Liebig definì il metabolismo come una successione di metamorfosi della materia e so-



stenne che la fisiologia doveva diventare una branca applicata della chimica organica. Su tali basi, i processi vitali potevano essere quantificati attraverso l'analisi dei prodotti di escrezione, in particolare dell'azoto eliminato.

Anche la fermentazione venne interpretata da Liebig in termini puramente chimici, in opposizione alle spiegazioni vitalistiche. Egli sostenne che si trattasse di una decomposizione indotta dalla putrefazione di sostanze organiche azotate, capace di trasmet-

tere un moto molecolare allo zucchero. L'ebollizione eliminava quindi la possibilità di fermentare perché alterava irreversibilmente la struttura molecolare: «La proprietà [...] di entrare in fermentazione o di marcire al contatto dell'aria [...] scompare intieramente alla temperatura della ebollizione», prova del fatto che l'attività fermentativa è legata «colla disposizione delle loro molecole» [1, pag. 216]. Il lievito non veniva considerato un organismo vivente, ma materia albuminoide in decomposizione, la cui instabilità chimica innescava la trasformazione.

Il successivo contrasto con Pasteur, secondo cui la fermentazione era l'effetto della crescita dei lieviti, portò allo scontro tra una visione biologica e una meccanicistica. Liebig ribatteva che la fermentazione è un fenomeno che si manifesta solo dopo la cessazione della forza vitale ed è una forma di decomposizione chimica delle sostanze organiche, difendendo la riducibilità dei fenomeni vitali alle leggi chimiche generali. Sebbene la posizione di Pasteur risultasse sperimentalmente vincente, l'approccio molecolare di Liebig contribuì in modo decisivo alla nascita della biochimica e dell'enzimologia moderna [4].

Da queste riflessioni scaturirono anche applicazioni tecniche, come la conservazione degli alimenti in recipienti sigillati e riscaldati, anticipando pratiche industriali successive.

### L'estratto di carne:

#### la formulazione scientifica di un alimento

Nel panorama ottocentesco della chimica applicata alla vita quotidiana, l'estratto di carne rappresentò uno dei casi emblematici del passaggio da una visione empirica dell'alimentazione a un approccio razionale fondato sull'analisi chimica. Le idee di Liebig sulla nutrizione come ricostruzione materiale dell'organismo e la respirazione come fonte energetica del corpo costituivano le premesse per le sue ricerche sulla carne e sul brodo, da cui nacque l'estratto concentrato di carne, destinato a rivoluzionare le abitudini alimentari e la cultura dell'Europa. Liebig propose una classificazione degli alimenti in due categorie funzionali: quelli capaci di trasformarsi nei tessuti, partecipando alla formazione di sangue, muscoli e organi, e quelli deputati esclusivamente a fornire energia attraverso la combustione interna. I primi, definiti da Liebig plastico-costruttivi,

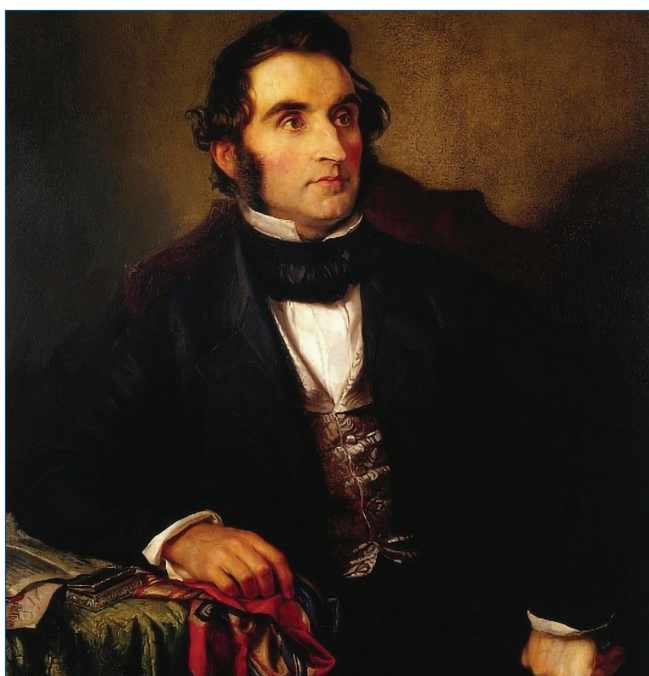


Fig. 1 - Justus von Liebig, ritratto di Wilhelm Trautschold, 1846 circa [https://www.wikiwand.com/en/articles/Justus\\_von\\_Liebig](https://www.wikiwand.com/en/articles/Justus_von_Liebig)



Fig. 2 - Laboratorio di Liebig a Giessen ([https://www.wikiwand.com/en/articles/Justus\\_von\\_Liebig](https://www.wikiwand.com/en/articles/Justus_von_Liebig))



erano responsabili della crescita e della rigenerazione dell'organismo; i secondi, ricchi di carbonio e idrogeno, interagivano con l'ossigeno inspirato per produrre calore e movimento, ma non contribuivano alla formazione della materia vivente. Da qui la sua famosa osservazione secondo cui «*Il vino, la birra e le bevande spiritose [...] non possono quindi essere considerate come alimenti di nutrizione*» [1, pag. 430], poiché insufficienti in principi capaci di trasformarsi in sangue o fibra muscolare. Il limite funzionale della seconda categoria si manifestava soprattutto nel digiuno: quando gli alimenti energetici venivano a mancare, l'organismo consumava sé stesso per alimentare la respirazione, perdendo parte della propria sostanza ad ogni atto respiratorio. Nutrizione e respirazione, dunque, risultavano inscindibili, due facce di un medesimo processo chimico che regolava il ricambio materiale.

Fu applicando questi principi all'analisi della carne che Liebig individuò la vera fonte del valore nutrizionale non nelle fibre muscolari, erroneamente considerate l'elemento principale, ma nelle sostanze solu-

bili contenute nel succo di carne: creatina, creatinina, inosite, acido lattico. Questi composti, responsabili del sapore e dell'attività fisiologica del brodo, erano considerati marginali fino ad allora, mentre la gelatina, pur apprezzata nella cucina tradizionale per la consistenza che conferiva ai piatti, veniva ritenuta erroneamente nutritiva. Liebig dimostrò, con chiarezza sperimentale, che la gelatina era quasi priva di valore nutrizionale, perché sprovvista di principi albuminoidi capaci di trasformarsi in sangue. Al contrario, la fibrina, definita come albumina solidificata, poteva essere facilmente convertita dall'organismo in nuova albumina, contribuendo così alla rigenerazione dei tessuti. Il parallelismo fra l'alimentazione dei carnivori, che si nutrivano di carne e sangue chimicamente identici ai loro, e quella dei lattanti, che trovavano nella caseina del latte gli stessi elementi della fibrina e dell'albumina, portò Liebig a formulare la celebre affermazione secondo cui «*L'animale carnivoro vive, per così dire, a spese della propria sostanza*», mentre il lattante «*non può svilupparsi che a spese di un altro organismo vivente*» [1, pag.

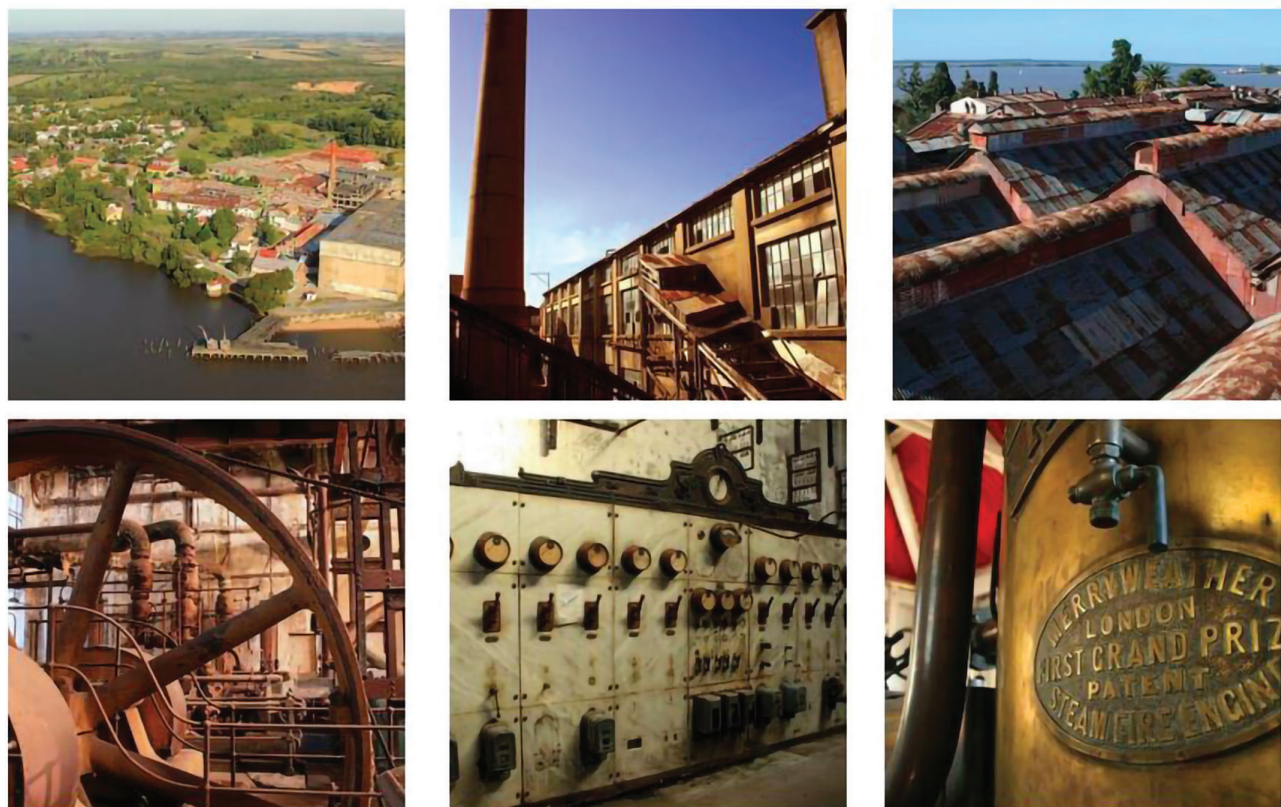


Fig. 3 - Paesaggio industriale di Fray Bentos (<https://whc.unesco.org/en/list/1464/gallery/>)





264-270], la madre. Una frase tanto incisiva quanto rivelatrice del nuovo paradigma biochimico.

La ricerca sulle proprietà nutritive della carne sfociò nella definizione del metodo per ottenere l'estratto: un concentrato delle sostanze solubili reali, libere da fibre inutili e da componenti degradati dal calore. Liebig mostrò che le parti saporite della carne si trasferivano in acqua fredda, mentre un riscaldamento moderato consentiva di eliminare albumina e materia colorante senza compromettere le sostanze azotate più sensibili. L'evaporazione lenta del liquido permetteva di ottenere, da circa 12-13 kg di carne, una massa scura e molle, intensamente aromatica, facilmente solubile e capace di riprodurre un brodo eccellente. Proprio questa concentrazione chimicamente selettiva spiegava l'azione corroborante dell'estratto, cui Liebig attribuì virtù terapeutiche, e che Parmentier, medico suo contemporaneo, descrisse come in grado di restituire rapidamente le forze in casi di grave debilitazione fisiologica.

Pur avendo elaborato una formula completamente funzionale già nel 1847, Liebig si scontrò con i limiti economici della produzione europea: servivano circa 30 libbre di carne per ottenere solo una libbra di estratto, rendendo la sua diffusione impraticabile in Germania. Decise dunque di offrire la formula gratuitamente e di collaborare con chi fosse stato in grado di realizzarla su scala commerciale.

Nel 1862 Liebig ricevette la visita dell'ing. Hermann Giebert, stabilitosi in Brasile ed interessato ad applicare il principio chimico della concentrazione alimentare ai *surplus* di carne sudamericana: "*Mi ha detto che non appena ha visto il mio resoconto sulla preparazione di questo estratto, è venuto a Monaco con l'intenzione di apprendere il procedimento, e poi di ritornare nell'America del Sud per intraprenderne la fabbricazione su larga scala*" [1, pag. 395].

Dopo trattative con Liebig, acquistò terreni e bestiame, e fondò a Fray Bentos una piccola fabbrica che nel 1865 spedì in Europa i primi lotti. Il prodotto, denominato *Extractum carnis Liebig*, apparve per la prima volta sul mercato britannico. Nacque così la *Liebig's Extract of Meat Company* (LEMCO), con Liebig direttore scientifico e promotore dell'applicazione della chimica all'industria alimentare (Fig. 3).

Liebig rimase attento alla qualità: "...se contenesse la minima traccia di grasso, che lo fa diventare rancido, o la sostanza collosa [...] sarei il primo ad affer-

*mare pubblicamente la sua inferiorità.*" [1, pag. 402]. L'estratto fu inizialmente commercializzato come tonico medico e integratore nutritivo, attraverso medici e farmacisti. I "*tè di carne*" venivano pubblicizzati come rimedio contro debolezza, disturbi digestivi e "*eccitazione cerebrale*". Liebig stesso ne sostenne il valore medicinale, arrivando a indicarne applicazioni in caso di tifo e infiammazioni. Le prime reazioni furono entusiastiche: nel 1865 la Royal Medical and Chirurgical Society di Londra riconobbe l'utilità dell'estratto nel trattamento dei pazienti debilitati, mentre nel 1868 l'ospedale St. Thomas di Londra riportò un consumo annuo di 12 mila vasetti [5].

Il successo commerciale non fu tuttavia esente da critiche. Nel 1865 *The Lancet* ospitò un articolato dibattito, che mise in evidenza divergenze teoriche e metodologiche profonde nel modo di concepire il valore nutrizionale degli alimenti. Le lettere di Arthur Hill Hassall [6] inaugurarono la polemica valutando l'estratto secondo criteri analitico-quantitativi, in particolare il contenuto in azoto e proteine, e confrontandolo direttamente con la carne fresca. Su questa base, Hassall concluse che l'estratto non potesse essere considerato un alimento nutriente in senso stretto e sollevò inoltre dubbi sulla sua autenticità commerciale, denunciando possibili adulterazioni con sale.

Le risposte di Justus Liebig [7], affiancate da interventi di sostenitori come W. Stevens Squire [8], chiarirono invece che tale impostazione era concettualmente fuorviante. Liebig ribadì che l'estratto di carne non era mai stato concepito come sostituto della carne né come alimento plastico, ma come preparazione contenente le sostanze estrattive caratteristiche della carne, in gran parte azotate ma non proteiche. Il valore dell'estratto risiedeva dunque nella sua azione fisiologica: stimolazione della secrezione gastrica, miglioramento della palatabilità degli alimenti e supporto alla digestione e all'assimilazione, soprattutto in condizioni di debolezza o convalescenza. Valutarne l'efficacia esclusivamente in termini di apporto proteico equivaleva, secondo Liebig, a giudicarlo per una funzione che non gli apparteneva.

Sul piano chimico-analitico, Liebig contestò anche le affermazioni di Hassall circa l'adulterazione salina [7], mostrando come il contenuto di ceneri dell'estratto autentico (circa 21-22%) rientrasse nei

valori attesi e come campioni reperiti sul mercato londinese risultassero conformi. La controversia si spostò così dal solo problema del “valore nutritivo” a quello, più generale, della correttezza metodologica delle analisi e della distinzione tra nutrizione quantitativa e azione funzionale degli alimenti.

Nel suo insieme, il dibattito del 1865 mette in luce una frattura epistemologica tipica della chimica e della fisiologia della nutrizione ottocentesche: da un lato una visione riduzionista, che identifica il valore alimentare con il contenuto proteico e il bilancio azotato; dall'altro l'approccio di Liebig, che riconosce un ruolo autonomo alle sostanze estrattive nel metabolismo e nella digestione.

Di fronte a tali contestazioni, la Liebig's Company modificò la strategia comunicativa, presentando l'estratto non più come alimento completo, ma come palliativo gustoso, capace di stimolare l'appetito e facilitare la preparazione di pietanze. Parallelamente, l'azienda intraprese un'intensa attività pubblicitaria, che anticipò le moderne tecniche di marketing. L'estratto veniva venduto in caratteristici vasetti bianchi con l'autografo di Liebig (Fig. 4) e accompagnato da materiali promozionali e ricettari. Nel 1893 Hannah M. Young, una ben nota scrittrice culinaria, pubblicò un ricettario commissionato dalla LEMCO, sottolineando come tali prodotti rendessero più economica e razionale la cucina domestica, anticipando i principi dell'“economia domestica” moderna [9]. Tuttavia l'elemento più originale fu l'uso delle figurine promozionali: dalle prime serie litografiche, raffiguranti la fabbrica di Fray Bentos,



Fig. 4 - Barattoli per estratto di carne. Nell'etichetta è visibile la firma di Liebig

fino alle collezioni tematiche in varie lingue, stampate con tecniche cromolitografiche di grande cura artistica. Dalla fine dell'Ottocento fino agli anni Settanta del Novecento, le figurine Liebig divennero oggetti di culto, veicoli di educazione visiva e scientifica, simboli della fusione fra industria alimentare e cultura di massa (Fig. 5).

Nel 1908, un'inchiesta mostrava come l'estratto non fosse solo un prodotto chimico, ma il risultato di una filiera agro-industriale avanzata. La LEMCO arrivò a gestire “1,302,386 acres and [...] 224,406 cattle” [10], trasformando l'allevamento estensivo in un laboratorio naturale di sintesi proteica, dove, per usare le parole del giornale [10], “l'intero accampamento è, in breve, uno stupendo esempio di vita all'aria aperta”.

La produzione seguiva ancora i principi di Liebig, evitando l'estrazione di gelatina: “La temperatura è compresa tra 80 e 94 °C, ma non si deve mai superare quest'ultima cifra, altrimenti l'estratto conterrebbe gelatina” [10, pag. 1240]. Il controllo chimico era rigoroso: “Il processo di estrazione, dall'inizio alla fine, è sottoposto alla supervisione di un chimico e vengono effettuate analisi periodiche” [10, pag. 1241].

L'estratto di brodo, nato da un'analisi scientifica della nutrizione e divenuto prodotto di consumo globale, testimonia la capacità della chimica ottocentesca di incidere sulla società, traducendo teoria e laboratorio in strumenti per migliorare la vita quotidiana. Pur non essendo, come mostrato dalle successive analisi nutrizionali, un alimento completo, esso inaugurò una nuova concezione dell'alimentazione: non più arte intuitiva, ma tecnica razionale fondata sulla conoscenza della materia. In questo senso, l'eredità di Liebig risiede non tanto nella sostanza contenuta nei vasetti, quanto nel metodo che portò alla loro invenzione: l'idea che comprendere la chimica della vita significa poterla trasformare.

### Conclusioni

L'estratto di carne di Liebig evidenzia la potenza della chimica nel migliorare la vita quotidiana. Pur non essendo alimento completo, la sua produzione sancì una nuova concezione dell'alimentazione fondata sulla conoscenza scientifica, anticipando l'industria nutrizionale moderna e dimostrando l'ef-



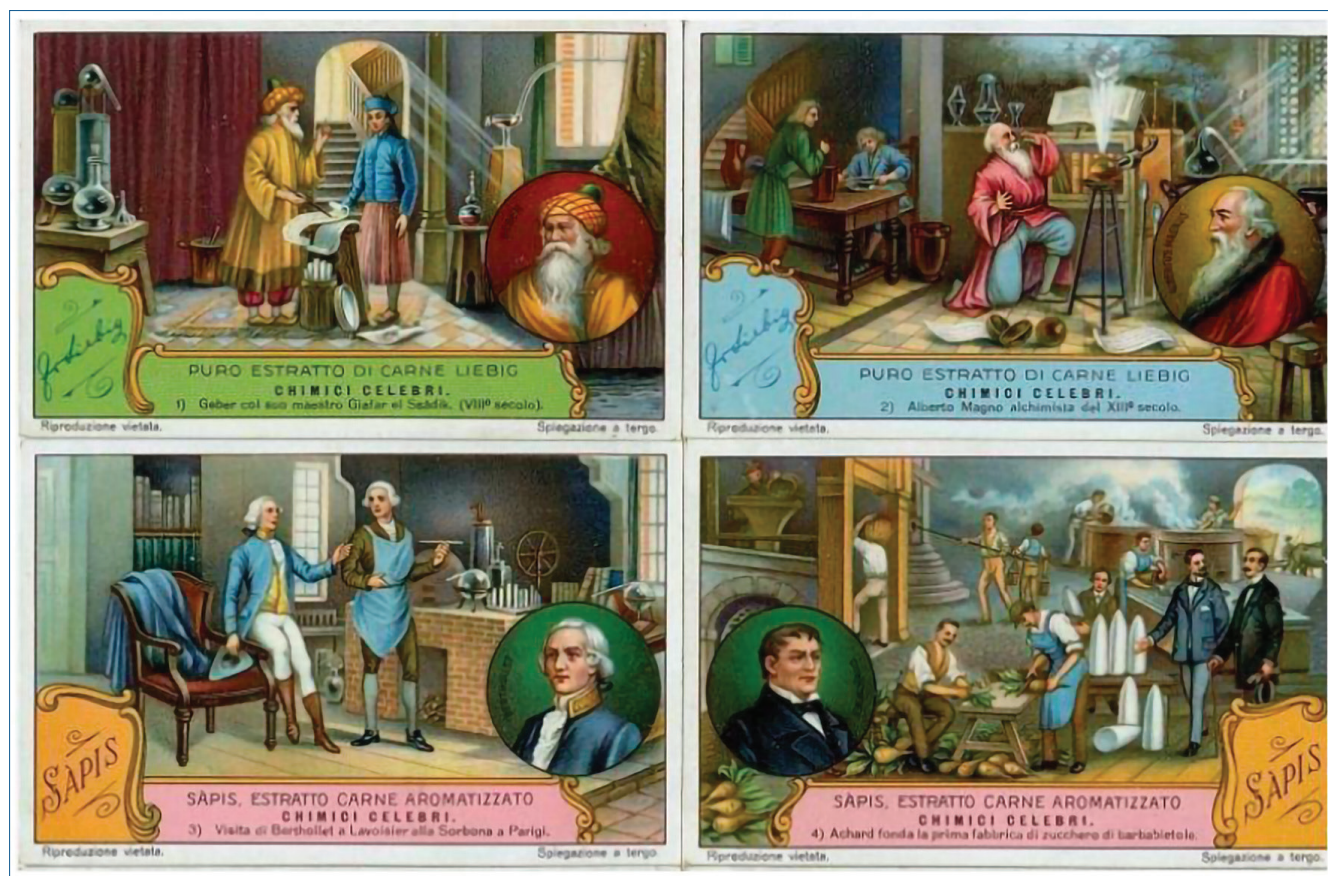


Fig. 5 - Figurine promozionali: serie "I grandi chimici"

ficacia sociale della ricerca. Nel 2017 Fray Bentos è stato inserito fra i siti UNESCO.

### Bibliografia

- [1] J. von Liebig, Lettere prime e seconde di Giusto Liebig sulla chimica e sue applicazioni all'agricoltura, alla fisiologia, alla patologia, all'igiene ed alle industrie. Tradotte dall'originale tedesco dal dott. Emilio Leone, Curatore Francesco Selmi - Tipografia Scolastica di Sebastiano Franco e figli e comp., Torino, 1857.
- [2] J.B. Wilbrand, Ueber den Zusammenhang der Natur mit dem Uebersinnlichen, Mainz, 1843.
- [3] J. von Liebig, Animal Chemistry or Organic Chemistry in its Applications to Physiology and Pathology, 1842, edizione inglese Cambridge University Press, UK, 1996.
- [4] F. Calascibetta, *Rendiconti della accademia nazionale delle scienze detta dei XL: memorie di scienze fisiche e naturali*, 1990, **108**, 227.
- [5] M.R. Finlay, *Bulletin of the History of Medicine*, 1992, **66**(3), 404.
- [6] A.H. Hassall, *The Lancet*, 1865, **86**, 49.
- [7] J. von Liebig, *The Lancet*, 1865, **86**, 469.
- [8] W.S. Squire, *The Lancet*, 1865, **86**, 386.
- [9] H.M. Young (Mrs.), *The Liebig Company's Practical Cookery Book*. London: Liebig's Extract of Meat Company, 1893.
- [10] *The Lancet Special Commission on the Origin, Manufacture and Uses of Extract of Meat*, *The Lancet*, 1908, **172**, 1233.

### Liebig's Meat Extract: an Example of the Social Application of Scientific Research

This paper examines how Justus von Liebig transformed chemistry into an applied discipline for vital processes, leading to the development of meat extract. Quantitative research and experimental methods provided the basis for industrial applications and modern food science.





Carlo Perego<sup>a</sup>, Paolo Pollesel<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Senior Advisor, Direttore dell'Istituto Donegani dal 2007 al 2018  
caregoperlo54@gmail.com

<sup>b</sup>Head of New Feedstocks and Energy Carriers Research Center, Eni SpA  
Responsabile dell'Istituto Donegani dal 2018 al 2025  
paolo.pollesel@eni.com

# L'ISTITUTO GUIDO DONEGANI: UNA STORIA SECOLARE

***L'Istituto Guido Donegani di Novara ha una lunga storia, avviata oltre un secolo fa. Nato come Istituto di chimica, è stato artefice di importanti innovazioni prima per la chimica industriale e petrolchimica, poi in tempi più recenti per le energie rinnovabili e l'ambiente. Negli anni ha accompagnato l'evoluzione dell'industria chimica italiana e poi di quella energetica, sapendo sempre adattarsi alle nuove sfide, come quella attuale della decarbonizzazione del settore energetico.***

**“S**alendo per le scale monumentali colpiva il silenzio. E il senso di entrare in un regno quieto e difficile, il regno delle ricerche pazienti affidate a uomini che quasi sorprendevo di trovare in comune abito civile, tanto il luogo splendidamente nudo dava l'idea di una regola certosa. Per gli immensi corridoi lucenti di marmi passavano da un laboratorio all'altro rare figure, il cui incedere, in quell'atmosfera di modernissima corsia, pareva non avesse suono. Fuori era un limpido meriggio di gennaio, e qualche cosa della sua luminosa purezza sembrava regnare anche nel tepore delle sale dell'Istituto. Attraverso qualche uscio socchiuso intravedemmo passando complicate teorie di apparecchi scientifici, su grandi banchi attorno ai quali vegliavano uomini assorti. - Vedo - osservai al nostro accompagnatore - che siete in pieno lavoro. - Il nostro compito - mi rispose - è la ricerca” [1].

Con questo *incipit* Roberto Negro avviava un articolo dal titolo “Il regno della Ricerca”, scritto per la rivista *Il Tempo*, del febbraio 1942. Si era dunque in piena Seconda Guerra Mondiale, con l'Italia Fascista già segnata da cocenti sconfitte sul fronte greco, nord africano e nella campagna di Russia. Questo però non aveva impedito che nel 1941, venisse inaugurato a Novara l'“Istituto di Chimica”, intitolato in seguito a Guido Donegani.

Leggendo l'articolo di Negro senza lasciarsi travolgere dallo stile, in piena armonia con la retorica fascista dell'epoca, si coglie una reale fede dell'allora Montecatini nella ricerca e sviluppo, testimoniata da

importanti investimenti, probabilmente assecondati anche in ottica militare. Sta di fatto che da allora l'Istituto Donegani è sempre stato un centro di eccellenza della ricerca italiana nel campo della chimica industriale prima, dei materiali, delle bioscienze e dell'ambiente in seguito, fino ai tempi più recenti dove il focus si è spostato su energie rinnovabili e transizione energetica.

L'Istituto Donegani ha segnato in questo modo la storia industriale italiana e dei suoi principali attori, da Montecatini a Montedison, da Enimont a Eni-chem, poi a Polimeri Europa fino ad Eni nelle sue diverse articolazioni.

### Le origini

L'Istituto fu realizzato sotto la presidenza della Montecatini di Guido Donegani, nello stesso sito industriale dove l'ingegnere novarese Giacomo Fauser, aveva avviato il primo impianto italiano di produzione di ammoniaca, fondando con Montecatini la Società Elettrochimica Novarese (maggio 1921). Accanto all'impianto di ammoniaca, nel 1922, venne realizzato il primo laboratorio di ricerca all'interno dello stesso stabilimento.

Il 13 novembre 1934 si inaugurò il nuovo Laboratorio di Ricerca di Chimica Inorganica, moderno centro attrezzato dalla Montecatini, dove Fauser cominciò ad interessarsi alla nascente petrolchimica italiana. L'anno successivo, grazie ai risultati ottenuti a livello pilota nella produzione di benzina e lubrificanti, tramite l'idrogenazione catalitica sotto pressione, degli scadenti petroli asfaltici albanesi, venne costituita

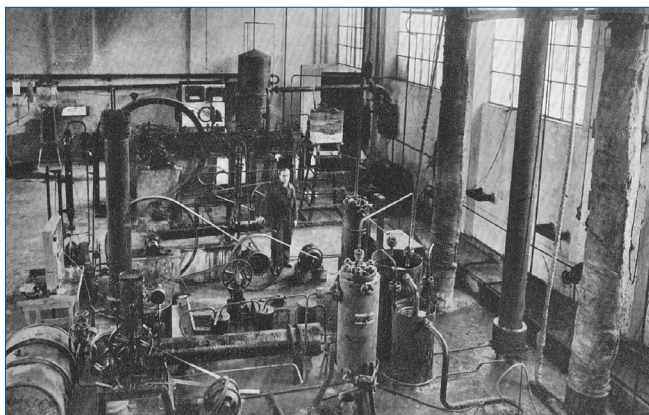


Fig. 1 - L'impianto pilota di idrogenazione dei petroli albanesi presso il Centro di Ricerche A.N.I.C. di Novara negli anni Trenta del secolo scorso



Fig. 2 - Un laboratorio dell'Istituto di Chimica nel 1942

l'A.N.I.C. (Azienda Nazionale Idrogenazione Combustibili), società mista Montecatini - Stato (50/50), e Fauser diventò direttore del Centro Ricerche A.N.I.C. di Novara. Il nuovo processo di idrogenazione venne industrializzato già nel 1938 presso la raffineria A.N.I.C. di Bari (Fig. 1).

Come si è già scritto, nel 1941 entrò in funzione, un po' sottotono a causa della guerra, il nuovo Istituto, contiguo al centro di ricerche A.N.I.C. (Fig. 2). Alla morte di Donegani, nel 1947, l'Istituto ne assunse il nome ed all'Istituto Guido Donegani, Fauser restò a lavorare per il resto della sua vita.

## Il dopoguerra e la ricostruzione

Sotto la direzione di Giacomo Fauser questo Istituto è stata la fucina dove è nata la petrolchimica italiana che tanto ha contribuito alla ricostruzione industriale post-bellica dell'Italia. Infatti Giacomo Fauser, nel Donegani del dopoguerra, diede inizio alla ricerca e allo sviluppo dei processi di chimica industriale, basati sul gas naturale e sul petrolio (Fig. 3).

Negli anni Cinquanta/Sessanta del secolo scorso, al Donegani si studiarono i processi di produzione di importanti prodotti chimici, quali idrogeno, acetilene, etilene, metanolo, acetaldeide, urea, partendo dal petrolio e soprattutto dal metano, che in quegli anni era stato scoperto e poi prodotto in Pianura Padana. Questi processi vennero poi applicati industrialmente negli stabilimenti Montecatini, incluso quello di Novara, ma anche licenziati ad altre compagnie chimiche nel mondo: nel 1971 si contavano ben 370 impianti chimici in tutto il mondo, realizzati secondo le tecnologie Fauser-Montecatini.

## Dalla petrolchimica alle materie plastiche

L'Istituto Donegani diede anche un contributo sostanziale allo sviluppo dei polimeri, che hanno rappresentato l'altro motore di crescita della chimica italiana. Infatti numerosi ricercatori del Donegani fecero parte della squadra del prof. Giulio Natta, premio Nobel per la Chimica nel 1963, per la scoperta del polipropilene. Natta, professore di Chimica Industriale al Politecnico di Milano, collaborò strettamente con Montecatini e le sue scoperte portarono allo sviluppo del polimero polipropilene, passato alla



Fig. 3 - L'Istituto Guido Donegani in una cartolina degli anni Cinquanta del secolo scorso

storia col nome “Moplen”, che la Montecatini produsse nei suoi stabilimenti di Ferrara. Nell’ambito della collaborazione con la Montecatini numerosi ricercatori del Donegani lavorarono con Natta, come dimostrano le numerose pubblicazioni e brevetti di quegli anni.

Nel 1966, con la fusione tra Montecatini ed Edison, nacque la nuova società Montecatini Edison SpA (abbreviata nel 1969 in Montedison), a cui fu conferito anche l’Istituto Donegani.

Negli anni successivi all’avvio della petrolchimica e dei materiali polimerici, l’Istituto Donegani iniziò ad occuparsi anche di altri settori emergenti della chimica, che portarono allo sviluppo di nuovi settori di business, che comprendevano la chimica fine, i prodotti per l’elettronica, i catalizzatori, le materie plastiche, la biologia, la farmaceutica e i fitofarmaci. Molti di questi settori divennero in seguito società autonome che hanno dato grande impulso alla attività industriale del novarese e italiana. Tra queste:

- Radici Chimica, in origine Rhodiatoc per la produzione di nylon, di cui l’Istituto Donegani curò l’avviamento e tenne la direzione fino al 1947;
- Clariant, in origine Attività Catalizzatori, realizzata gradualmente a partire dagli anni Cinquanta nell’ambito dell’Istituto Donegani e infine evoluta negli anni Settanta ad azienda autonoma per ricerca, produzione e commercializzazione di catalizzatori in Italia e nel mondo;
- Memc, primaria industria a livello mondiale per la produzione di silicio elettronico, originata dagli studi dell’Istituto Donegani negli anni Cinquanta in una SpA del gruppo Montedison.

## La “svolta” degli anni Ottanta

Nel 1981 la Montedison da società controllata dallo Stato diventò un gruppo a controllo maggioritario di capitale privato. Ne conseguì una riorganizzazione con struttura di holding con una razionalizzazione delle attività industriali di interesse. Anche la ricerca venne completamente riorganizzata. Se fino a tutti gli anni Settanta la ricerca era decentrata e allocata presso le divisioni operative, con oltre 30 tra centri, unità e laboratori di ricerca, con la nuova organizzazione si formarono quattro poli di ricerca Montedison: Novara, Istituto Donegani (progetti a lungo termine e alto rischio); Nerviano (cura della salute); Bollate (scienza e ingegneria dei materiali); polo padano Marghe-

ra-Mantova-Ferrara (chimica di base e petrolchimica). Alla riorganizzazione della ricerca corrispose una riorganizzazione dell’Istituto. All’amministratore delegato, prof. Amilcare Collina, oltre alle aree specialistiche e all’ingegneria, riportavano anche i progetti principali che da soli assorbivano il 70% dei costi di ricerca. Questi nuovi progetti erano finalizzati allo sviluppo di biopolimeri, materiali ceramici, cristalli liquidi, nuovi antiparassitari, materiali termoplastici rinforzati e sistemi di automazione della ricerca.

Negli anni Ottanta si verificò anche l’enucleazione e l’avvio di attività industriali originate e cresciute accanto dall’Istituto, che fu quindi un motore di crescita e di sviluppo del territorio, generando molteplici emanazioni industriali ancora oggi vive e produttive. Tra queste aziende si ricordano la Novamont (ora parte di Versalis, società chimica di Eni), leader nelle materie plastiche biodegradabili; Isagro per gli agro-farmaci, Donegani Anticorrosione per il monitoraggio e la prevenzione della corrosione nell’industria.

## La vicenda Enimont

Nel 1988 la Montedison conferì la società Istituto Guido Donegani alla neonata Enimont, *joint-venture* tra Eni e Montedison. Durante il periodo Enimont, l’Istituto prese il nome di Centro di Ricerca Corporate e iniziò nuove ricerche in ambiti altamente tecnologici.

Sciolta definitivamente Enimont nel 1991, l’Istituto Donegani passò sotto il controllo di Enichem, poi Polimeri Europa, che sciolse la SpA e trasformò l’Istituto nella sua direzione di ricerca centralizzata.

In un’interrogazione parlamentare presentata dall’onorevole Giovanni Russo Spina nel marzo 1993, si denunciava la preoccupante riduzione del personale dell’Istituto Donegani che, complessivamente in tutte le sue sedi (Novara come principale, ma anche Milano e Napoli), era passato da 588 addetti nel settembre 1991 a 260 nel dicembre 1992 [2].

## La “svolta” Eni

La crisi della chimica industriale di fine secolo aggravò ulteriormente la situazione denunciata da Spina. Dopo la riorganizzazione della chimica Eni, il Donegani finì in Polimeri Europa con un ulteriore ridimensionamento. Furono di questi anni alcuni interventi mirati a richiamare l’attenzione dell’opinione pubblica e della politica. In un articolo su *La Chimica*





ca e *l'Industria* del marzo 2004, Francesco Traina, già direttore di Montecatini catalizzatori, scriveva: “la Direzione di Polimeri Europa comunica... una nuova organizzazione dell'Istituto che prevede il taglio... di 50-53 unità sulle attuali 193. Si sta tentando quindi di porre in atto la più grave riduzione di organico mai pianificata dal 1980...”.

Questo ulteriore e progressivo ridimensionamento si arrestò però con la definitiva incorporazione dell'Istituto Donegani in Eni nel 2006. Non si trattò soltanto di una operazione di carattere organizzativo, ma di una vera svolta anche in termini di missione.

Infatti, Eni assegnò all'Istituto Donegani una nuova missione: da polo per la ricerca chimica a centro di riferimento di Eni per la ricerca nel campo delle energie rinnovabili. Nel 2007 l'Istituto Donegani diventò il Centro di Ricerca Eni per lo sviluppo di tecnologie nel campo delle fonti di energia non convenzionali - da cui la denominazione: Centro Ricerche per le Energie Non Convenzionali - Istituto Eni Donegani (Fig. 4).

Le attività del Centro furono focalizzate sul programma di ricerca *Along with Petroleum*, lanciato da Eni nel 2007 e volto a conseguire *breakthrough* tecnolo-



Fig. 4 - Prototipo di finestra fotovoltaica con i concentratori solari luminescenti sviluppati al Centro Ricerche per le Energie non Convenzionali



Fig. 5 - Celle fotovoltaiche polimeriche preparate al Centro Ricerche per le Energie non Convenzionali

gici nell'utilizzo dell'energia solare e delle biomasse - che Eni riteneva le fonti rinnovabili con maggiori potenzialità di utilizzo su larga scala e sostenibile dal punto di vista ambientale e economico (Fig. 5).

Nel corso del 2009 si completò anche il processo di centralizzazione presso l'Istituto delle risorse e delle competenze di Eni dedite alla ricerca in ambito ambientale, avviando un nuovo programma di ricerca volto allo sviluppo di tecnologie per le bonifiche di siti industriali e per interventi di *clean up* di terreni, falde e corsi d'acqua contaminati.

### Le attuali linee di ricerca

Per accelerare l'ingresso nell'innovazione delle energie rinnovabili, nel 2008 Eni siglò un accordo con il MIT di Boston, già leader su alcuni progetti di ricerca in questo settore, per consolidare la focalizzazione del Donegani come polo italiano per lo sviluppo delle fonti rinnovabili, con particolare riferimento alla parte solare.

Una decisione non solo tempestiva ma anche premiata da buoni risultati, grazie anche alle forti competenze scientifiche ereditate dalle precedenti configurazioni, che si sono convertite con successo ai nuovi obiettivi. Competenze che si sono poi allargate anche ad altri settori quali l'elettronica e l'optoelettronica, grazie anche ad un solido *network* con università e centri di ricerca a livello internazionale, ma con un particolare interesse per l'Italia, dove viene mantenuto un essenziale e vitale legame con il territorio.

Attualmente sono quattro le aree principali nelle quali opera il Centro Ricerche di Novara, come viene ora formalmente chiamato l'Istituto Donegani: energia solare, nelle due declinazioni di fotovoltaico e solare

a concentrazione; accumulo energetico; bioenergia. Per il fotovoltaico, si stanno studiando sistemi di conversione della radiazione solare in elettricità basati su sostanze alternative o complementari al silicio. È un'attività di prospettiva, ma ci sono alcune classi di composti che stanno dando risultati molto promettenti, ad esempio le perovskiti. Questi composti possono essere anche stesi in film sottili, aprendo la via a superfici fotovoltaiche posizionabili anche su superfici verticali o curve, ma possono anche essere accoppiate a moduli al silicio (celle tandem), ottenendo efficienze molto elevate. Oltre ai progetti più innovativi, ci sono anche attività più incrementalmente o di supporto diretto al business per valutazione dei prodotti fotovoltaici disponibili sul mercato e delle novità tecnologiche. Mediante la combinazione di tecniche di caratterizzazione indoor (tra cui un simulatore solare di larga area, Fig. 6) e di un laboratorio solare all'aperto (*solar lab*) si valutano i comportamenti dei moduli fotovoltaici, per definire al meglio i parametri di effettiva performance, valutando anche il comportamento e la variazione di prestazioni nel tempo. Diversa la tecnologia del solare a concentrazione (*Concentrated Solar Power, CSP*), che sfrutta il principio degli specchi di Archimede o specchi parabolici. È un sistema concavo che raccoglie la radiazione



Fig. 6 - Modulo fotovoltaico esposto a Simulatore Solare di larga area

solare e la concentra in un punto, il fuoco. In questo punto viene posizionato un tubo, dove scorre un fluido che viene riscaldato ad alta temperatura; il calore così trasportato dal fluido potrà essere utilizzato per produrre energia (ad esempio, tramite una turbina a vapore) oppure per alimentare un processo industriale o per riscaldamento. La tecnologia CSP di per sé non è quindi un concetto così nuovo, ma la tecnologia sviluppata da Eni contiene elementi di innovazione che riguardano il design della parabola. Innanzitutto, la facilità di assemblaggio, che la rende più agevole da implementare anche in zone remote o dove non è facile reperire localmente un contenuto tecnologico elevato. Altra peculiarità è l'utilizzo di film metallici in luogo degli specchi riflettenti, che rendono la parabola più leggera, robusta e facile da trasportare. L'accumulo energetico è un altro tema strategico in vista della crescente diffusione delle fonti rinnovabili. L'accumulo energetico permette, infatti, di dare continuità alle fonti rinnovabili che per loro natura sono discontinue, perché rende disponibile l'energia da rinnovabili accumulata nelle ore di sovrapproduzione per utilizzarla quando questa non viene prodotta (ad esempio di notte, per l'energia solare). Questo consente anche di evitare di sovradimensionare gli impianti di produzione a parità di energia installata. Lo *storage* aumenta quindi l'efficienza complessiva della produzione e dell'impiego di rinnovabili, mediante sistemi che possono essere elettrici (batterie), ma anche termici.

Nel primo caso, i dispositivi in sviluppo in Eni non sono quelli adatti alla mobilità, che vedono già un mercato maturo e ben presidiato. Si investe principalmente nella ricerca su batterie destinate all'uso stazionario; a questo proposito, si studiano in particolare le cosiddette batterie a flusso. La loro caratteristica sostanziale è il disaccoppiamento fra la parte di energia e quella di potenza: è possibile aumentare l'energia immagazzinata, agendo sul volume dei serbatoi di elettrolita, senza variare lo *stack* di potenza, ottimizzando così l'efficienza del sistema. Diversamente dalle batterie per le auto, queste batterie si ricaricano più lentamente, ma erogano anche potenza in modo più stabile e continuativo, potendo assicurare l'erogazione anche per molte ore. In tal modo le batterie a flusso sono particolarmente adatte per servizi di *time shifting*, in cui l'energia prodotta con le fonti rinnovabili, che in certi momenti è di gran





lunga superiore alla richiesta, può essere stoccata per poi essere redistribuita nel momento in cui può contribuire alle esigenze della rete, e viene meglio remunerata. Fra i vantaggi importanti c'è poi l'utilizzo di composti alternativi al litio, come ad esempio il vanadio, meno critico dal punto di vista della filiera di approvvigionamento o della sicurezza. Inoltre, grazie a questo disaccoppiamento fra le due parti, evitano il problema che affligge tutte le batterie che utilizziamo normalmente, dalle stilo, ai telefoni, fino alle automobili: il processo di autoscarica.

Parlando invece di accumulo termico, si sta lavorando a un sistema che consente di immagazzinare il calore trasportato da un fluido termovettore, che può essere anche quello che proviene dal CSP. Si tratta di un cilindro in calcestruzzo con una formulazione speciale nel quale sono state progettate delle cavità *ad hoc* che consentono lo scorrimento del fluido caldo, che scalda così la massa di calcestruzzo (Fig. 7). Grazie alla sua inerzia termica, il calcestruzzo conserva il calore per un determinato tempo e può rilasciarlo, nel momento in cui si reimmette nel sistema un fluido freddo.

Altro tema di ricerca di grande importanza è la valorizzazione delle biomasse per produrre biocarburanti. Nonostante la progressiva elettrificazione della mobilità, i biocarburanti continueranno ad avere un ruolo cruciale per la decarbonizzazione del settore dei trasporti. Difficilmente, infatti, si potrà prescindere dai biocarburanti nei settori cosiddetti *hard to electrify*: trasporto su strada *heavy duty*, aviazione, marina.

Eni ha già convertito le raffinerie di Venezia e Gela in bioraffinerie, che producono HVO diesel utilizzabile in purezza e al 100% da materie prime rinnovabili, prevalentemente di scarto o residui di lavorazione di oli vegetali o di colture oleaginose; altri progetti sono allo studio, ed è in corso la trasformazione in bioraffineria a Livorno. Per alimentare questi impianti, già da tempo non si utilizza più olio di palma e la ricerca sta lavorando per selezionare ed utilizzare coltivazioni che crescono su terreni cosiddetti marginali (es. ricino, canola, camelina, jatropha, ecc.), che non competono con usi *pro-food*, in quanto non hanno caratteristiche idonee per la crescita di colture alimentari. Il biocarburante che si ottiene dalle bioraffinerie, chiamato HVO (*Hydrogenated Vegetable Oil*) è fortemente migliorativo rispetto al classico "biodiesel"



Fig. 7 - Impianto pilota "Thermal Storage"

che si ottiene da transesterificazione con metanolo: è completamente paraffinico, privo di aromatici e di zolfo, con un numero di cetano molto alto. Può essere utilizzato al 100% o in miscela col diesel convenzionale, e il processo produce oltre al taglio diesel anche *bio-jet fuel* per il trasporto aereo, *bio-gpl* e *bio-naphta*.

Anche il residuo della spremitura dei semi da cui si ricavano gli oli vegetali può diventare biomassa riutilizzabile. Con un processo termico (pirolisi) gli scarti si possono convertire in *biochar*, una sorta di carbone vegetale, caratterizzato da elevata porosità e quindi particolarmente capace di trattenere liquidi. Questo materiale può essere restituito come ammendante a quegli stessi terreni che, proprio perché sono semiaridi o non particolarmente pregiati, possono fortemente beneficiare di un fertilizzante naturale, in grado di dosare e diffondere al meglio acqua e nutrienti. È possibile insomma chiudere un cerchio che parte dalla pianta, passa dalla produzione di un carburante in sostituzione del corrispondente fossile, dunque con risparmio di CO<sub>2</sub>, e si conclude con





Fig. 8 - L'impianto pilota per la trasformazione della frazione organica dei rifiuti urbani (FORSU) in bio-olio

la restituzione del carbonio al terreno: il ciclo delle emissioni si avvicina allo zero.

Oltre alle biomasse "agricole", attualmente vengono prevalentemente utilizzate come cariche per le bioraffinerie scarti, quali oli esausti di cottura e grassi animali, e residui agro-forestali. A Novara è anche stata ideata e sviluppata la tecnologia *Waste to Fuel*, per la conversione termochimica, una sorta di *hydrothermal pyrolysis*, della frazione organica di rifiuti solidi urbani in un bio-olio potenzialmente utilizzabile come vettore energetico (in Fig. 8 l'impianto da 3 kg/h).

## Cronistoria del nome

1922: Laboratorio Ricerca - Società Elettrochimica Novarese
1934: Laboratorio di Ricerca di Chimica Inorganica - Montecatini
1936: Centro Ricerca - A.N.I.C.
1941: Istituto di Chimica - Montecatini
1947: Istituto Guido Donegani - Montecatini
1974: Istituto Guido Donegani - Montecatini Edison
1979: Istituto Guido Donegani SpA - Montedison
1984: Istituto Guido Donegani SpA (Montedison Holding)
1988: Istituto Guido Donegani SpA (Enimont)
1991: Istituto Guido Donegani (Enichem)
2003: Istituto Guido Donegani (Polimeri Europa)
2006: Istituto Guido Donegani (Enitecnologie)
2007: Centro Ricerche Novara (Eni SpA, Refining & Marketing)
2008: Centro Ricerche per le Energie non Convenzionali - Istituto Eni Donegani (Eni)
2014: Centro Ricerche per le Energie Rinnovabili e l'Ambiente (Eni)
2020: Centro Ricerche per le Energie Rinnovabili, la Fusione Magnetica e la Scienza dei Materiali (Eni)
2022: Centro Ricerche Eni di Novara (Eni)

Nel campo del trattamento di *waste* e della circolarità, presso il Centro Ricerche di Novara sono stati recentemente avviati progetti per il recupero di materie prime critiche da scarti quali rifiuti elettrici ed elettronici (RAEE), pannelli fotovoltaici e batterie esauste. Quest'ultima attività in particolare può supportare le recenti iniziative industriali di Eni per la produzione ed il trattamento di batterie al litio.

## Conclusioni

In conclusione, l'attuale Centro Ricerche Eni di Novara affonda le sue radici in una storia avviata da oltre un secolo. Una storia gloriosa di innovazione: nel tempo ha saputo essere motore di crescita e sviluppo prima della chimica industriale, poi della petrolchimica per arrivare in tempi più recenti alle energie rinnovabili e all'ambiente. Questo Centro di Ricerca, nelle sue diverse articolazioni e denominazioni, ha accompagnato e, in qualche misura, indirizzato l'evoluzione dell'industria chimica italiana, condividendone crescita e decrescita. Sapendo sempre adattarsi ai nuovi scenari ed alle nuove esigenze tecnologiche, applicando le competenze scientifiche distintive in modo flessibile ed efficiente per affrontare di volta in volta nuove sfide, come quella attuale della decarbonizzazione del settore energetico.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] R. Negro, *Il Tempo*, 5-12 febbraio 1942, anno VI, pag. 41-45.
- [2] G. Russo Spena, Interrogazione parlamentare 4/11639, 3 marzo 1993.
- [3] F. Traina, *La Chimica e l'Industria*, 2004, **86**(2), 32.

### The Istituto Guido Donegani: a Centuries-old History

The Istituto Guido Donegani in Novara has a long history, dating back over a century. Founded as a Chemistry Institute, it pioneered important innovations, first in industrial chemistry and petrochemistry, and then, in renewable energy and environmental technologies. Over the years, it has accompanied the evolution of the Italian industrial chemistry and subsequently of the energy sector, always adapting to new challenges, such as the current decarbonization of the energy sector.

## CHIMICA GENERALE

*Principi e applicazioni moderne*

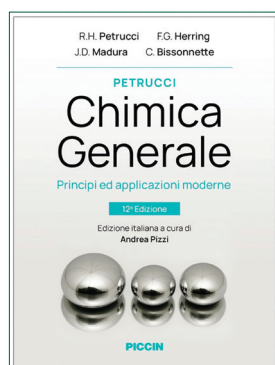
di R.H. Petrucci, F.G. Herring,

J.D. Madura, C. Bissonnette

Piccin Editore

Pag. 1500, brossura, 50 euro

ISBN 9788829935833



Il testo, oramai giunto alla quinta edizione italiana sulla dodicesima in lingua inglese, può essere definito senza dubbio un grande classico per l'insegnamento della Chimica generale, soprattutto per studenti di corsi di laurea in cui la chimica ha un ruolo propedeutico rispetto ad altri insegnamenti

(come biologia, medicina, ingegneria, scienze ambientali e agraria).

Partendo dalle basi della materia, sviluppate nei primi capitoli, il testo si apre poi a tutti gli aspetti fondamentali della chimica generale, offrendone un'ampia e approfondita panoramica. In questo modo, anche lo studente che non disponesse di conoscenze pregresse o necessitasse di un ripasso può affrontare lo studio della materia a partire dalle idee più semplici. Entrando più nel dettaglio dell'organizzazione del libro, mantenuta sostanzialmente identica a quella delle precedenti edizioni (a parte uno spostamento in avanti della parte di cinetica), i primi venti capitoli sono dedicati alla chimica generale propriamente detta (proprietà e misura della materia, atomi e teoria atomica, composti chimici, reazioni, reazioni in soluzione, gas, termochimica, meccanica quantistica, tavola periodica e relative proprietà, legame chimico, forze intermolecolari nei liquidi e nei solidi, termodinamica, soluzioni e loro proprietà, cinetica, equilibrio, acidi e basi, solubilità e ioni complessi, elettrochimica). Seguono poi tre capitoli di chimica inorganica descrittiva, un capitolo sui composti di coordinazione, uno di chimica nucleare e, per finire, tre capitoli con focus sulla chimica organica e sulla biochimica.

Una novità rispetto alle precedenti edizioni è costituita dall'inserimento di brevi profili di venti illustri scienziati che hanno dato un contributo fondamentale allo sviluppo della chimica, con l'obiettivo di

dare allo studente un'idea del panorama ampio e variegato della comunità scientifica.

Il testo, poi, è stato aggiornato in diverse sue parti: l'indice generale, reso di più facile lettura; la grafica, modernizzata e più accattivante; gli esercizi alla fine dei capitoli, rivisti e rinnovati.

Vorrei soffermarmi in particolare su quest'ultimo punto. Chiunque di noi abbia esperienza nell'insegnamento della chimica generale sa bene quanto sia importante ai fini didattici integrare la spiegazione dei concetti con lo svolgimento di esercizi che consentano allo studente di mettersi alla prova "sul campo" e diventare consapevole di quanto abbia effettivamente capito.

Da questo punto di vista, il testo di Petrucci è una vera miniera. Oltre ai numerosi esempi risolti e ai box di "verifica dei concetti" integrati nei vari paragrafi, presenta al termine di ogni capitolo un sommario dei concetti-chiave discussi, un esempio integrativo con analisi e risoluzione e una serie cospicua di esercizi divisi proprio in base ai concetti-chiave riportati nel sommario e raggruppati in tre categorie di difficoltà crescente (esercizi, esercizi integrativi e avanzati, esercizi di auto-verifica). Gli esempi risolti sono sempre corredati da almeno un paio di "esempi pratici", che hanno un testo e una modalità di risoluzione analoga. In questo modo lo studente può mettere subito alla prova le competenze acquisite. Similmente, di un'ampia selezione degli esercizi a fine capitolo viene fornito il risultato nell'appendice G. Molto utili sono anche le altre appendici al testo, in cui sono richiamate le operazioni matematiche e i concetti fisici fondamentali, le unità del Sistema Internazionale, alcuni dati sperimentali importanti (termodinamici, di solubilità, elettrochimici) e un glossario dei principali termini presenti nel libro. Un'appendice interessante e insolita è quella che descrive la preparazione di mappe concettuali, mostrandone anche un esempio.

Infine, un punto di merito da segnalare di questa edizione è quello di essere stata modificata per seguire le raccomandazioni IUPAC, in particolare per quanto riguarda la tavola periodica e le quantità termodinamiche.

In conclusione, quindi, il Petrucci si conferma un ottimo, completo e aggiornato manuale per l'insegnamento della chimica generale, integrando in modo egregio teoria ed esercizi.

Francesca Eleonora Vittoria Giovanna Tessore



a cura di Silvia Cauteruccio e Monica Civera

Dipartimento di Chimica

Università di Milano

silvia.cauteruccio@unimi.it

monica.civera@unimi.it

## Applicazioni della meccanochimica in sintesi organica

Questa rubrica prosegue il viaggio nel mondo affascinante della meccanochimica, esplorando gli studi più recenti dedicati soprattutto all'attivazione dei materiali polimerici e alla sintesi di molecole di chimica fine. Si tratta di un campo in continua evoluzione, dove la produzione scientifica è così ricca e dinamica che merita di essere raccontata e compresa, soprattutto per le sue potenziali ricadute nel campo della chimica sostenibile, dove l'innovazione non è solo desiderabile, ma necessaria. L'approccio meccanochimico è infatti capace di offrire soluzioni concrete ai limiti della chimica tradizionale "in soluzione", soprattutto in relazione alla riduzione del consumo di solventi, all'efficienza energetica e all'implementazione di processi più sostenibili.

È stato, ad esempio, sviluppato un protocollo meccanochimico estremamente semplice che sfrutta l'energia meccanica generata tramite mulino a sfere per indurre la scissione omolitica delle catene polimeriche del polivinilcloruro (PVC) e generare così HCl, senza ricorrere a riscaldamento esterno, agenti attivanti o solventi organici [H. Ito *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2026, **148**, 1953]. Calcoli quantomeccanici indicano che il percorso meccanochimico, basato sulla formazione di meccanoradicali, presenta energie di attivazione significativamente più basse (64-79 kJ/mol) rispetto a quelle del tradizionale percorso termico (163 kJ/mol). Ciò permette di operare in condizioni molto più blande, garantendo al tempo stesso un controllo preciso sulla quantità di HCl prodotta. Quest'ultima può infatti essere modulata regolando l'intensità della sollecitazione meccanica esercitata dal mulino a sfere. Il valore aggiunto di questo protocollo risiede nel fatto che può essere utilizzato per promuovere reazioni di sostituzione nucleofila ( $S_N1$ ) di alcoli alillici e benzilici con vari nucleofili in assenza di solvente (Fig. 1a). In questo contesto, il PVC funge da reagente solido in grado di rilasciare tramite processo meccanochimico acido di Brønsted, attivando così l'alcol verso la reazione. È rilevante osservare che queste reazioni procedono in modo efficiente anche quando si utilizzano rifiuti plastici a base di PVC, dimostrando ancora una volta il potenziale della meccanochimica nel trasformare materiali

plastici comuni, poco reattivi ed abbondanti in veri e propri reagenti chimici per la sintesi di molecole ad alto valore aggiunto, il tutto operando in condizioni blande.

Nell'ambito dei processi meccanochimici applicati alla sintesi di prodotti di chimica fine, è stato recentemente messo a punto un protocollo per la formazione di legami ammidici mediante macinazione a sfere in un reattore *Dyno<sup>®</sup>-Mill Research Lab*. [C.O. Kappe *et al.*, *Green Chem.*, DOI: [10.1039/d5gc04764a](https://doi.org/10.1039/d5gc04764a)]. Il legame ammidico è estremamente diffuso nelle molecole di interesse farmaceutico e agrochimico; tuttavia, la sua formazione rappresenta ancora una delle trasformazioni più difficoltose dal punto di vista ambientale. Le reazioni di ammidazione tradizionali richiedono infatti protocolli caratterizzati da un elevato consumo di solventi considerati "problematici", come DMF e NMP, oggi sempre più soggetti a restrizioni normative, oltre che da quantità più che stechiometriche di agenti condensanti, basi ed eventuali additivi. Attraverso un'ottimizzazione sistematica dei principali parametri meccanochimici, è stato possibile effettuare la reazione di ammidazione in alte rese su un'ampia gamma di substrati, utilizzando EDC·HCl come agente condensante in condizioni equimolari, senza eccessi di reagenti né basi aggiuntive (Fig. 1b). Il processo è stato ulteriormente migliorato in condizioni di macinazione assistita da piccole quantità di liquido (*liquid-assisted grinding*), usando solo quantità minime di acetato di etile come additivo ottimale grazie alla sua elevata efficacia e alla bassa tossicità. Inoltre, l'isolamento dei prodotti non richiede l'impiego di solventi organici, ma si basa esclusivamente su processi di precipitazione, filtra-

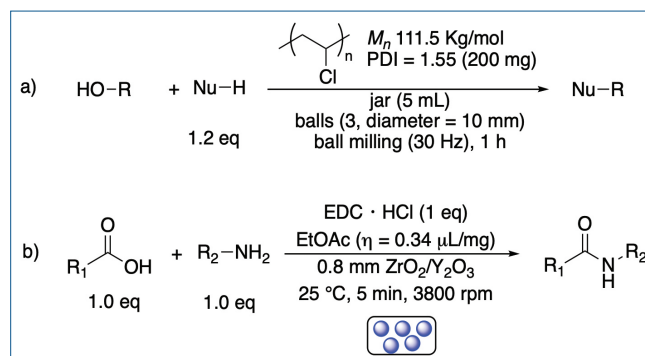


Fig. 1





zione e lavaggio con acqua, evidenziando la praticità del protocollo su scala maggiore. Un aumento di scala di venti volte ha permesso di raggiungere una produttività fino a 2,89 kg/ora, senza eccesso di reagenti, basi aggiunte e solvente in grandi quantità, riducendo sostanzialmente gli scarti.

### DrugCLIP, un nuovo machine learning tool per lo screening virtuale su scala genomica

Nel 2023, il gruppo di scienziati che gestisce il database *UniProt*, la più grande banca dati di sequenze proteiche di tutti gli esseri viventi e virus, ha creato un dataset denominato *UniProt Knowledgebase* (UniProtKB) (UniProt Consortium, *Nucleic Acids Res.*, 2023, **51**, D523). In questo dataset, ogni sequenza proteica è collegata alle relative informazioni funzionali, verificate sperimentalmente o predette computazionalmente e curate manualmente. Tuttavia, delle circa 20 mila proteine umane identificate, solo una piccola parte è attualmente oggetto di ricerca terapeutica. Se da una parte strumenti basati su AI, come *AlphaFold*, possono contribuire all'avanzamento di nuove terapie superando il limite delle strutture proteiche mancanti, i tools di screening virtuale, come il *docking* molecolare o i metodi di deep learning per la predizione dell'affinità, risultano ancora troppo lenti e poco precisi per affrontare uno screening su larga scala a livello di proteoma umano.

Nel caso di DrugCLIP [Y. Jia *et al.*, *Science*, 2026, DOI: [10.1126/science.ads9530](https://doi.org/10.1126/science.ads9530)], gli autori propongono un nuovo approccio, la cui innovazione risiede nell'utilizzo di due reti neurali distinte per la codifica delle tasche proteiche e dei ligandi, addestrate con un approccio di *contrastive learning* ad imparare la probabilità di legame. A differenza dei metodi di deep learning che predicono l'affinità in modo regressivo, DrugCLIP utilizza una metrica di similarità vettoriale tra le codifiche delle rappresentazioni del ligando e della tasca proteica, imparando a massimizzare la somiglianza tra tasche e i loro ligandi (coppie proteina-ligando positive) e a minimizzarla tra tasche e molecole che si legano ad altri bersagli (coppie proteina-ligando negative).

L'algoritmo prevede una fase di *pre-training* (A-B, Fig. 2) e una di *fine-tuning* (C-D, Fig. 2). Per la parte delle proteine si utilizza il tool *ProFSA*, sviluppato

dagli stessi autori, capace di identificare e codificare automaticamente potenziali tasche proteiche. *ProFSA* consente di mitigare la scarsità di dati sui complessi proteina-ligando esistenti e di ampliare il numero di tasche, generando frammenti peptidici a partire dalla proteina stessa. Questi frammenti vengono utilizzati come pseudoligandi per identificare le regioni circostanti e classificarle come pseudotasche. Il tool *Uni-Mol*, invece, codifica i ligandi.

Dopo il *pre-training*, le codifiche di molecole e tasche proteiche passano ad una fase di *fine-tuning*, dove le coppie proteina-ligando determinate sperimentalmente (database BioLip2) sono utilizzate come dati di addestramento, includendo anche molteplici conformazioni per i ligandi.

Poiché le rappresentazioni di molecole e tasche possono essere calcolate *offline*, lo screening con DrugCLIP risulta altamente efficiente: richiede solo il calcolo di una semplice somiglianza (ad esempio, il coseno tra i vettori della codifica tasca-ligando) e la successiva classificazione basata sul valore di similarità. Il database finale, *GenomeScreen-DB*, contiene oltre 2 milioni di potenziali molecole hit per più di 20.000 tasche provenienti da 10.000 proteine umane (Fig. 2E) e costituisce una *pipeline* virtuale di *screening* a livello genomico per facilitare la scoperta futura di farmaci.

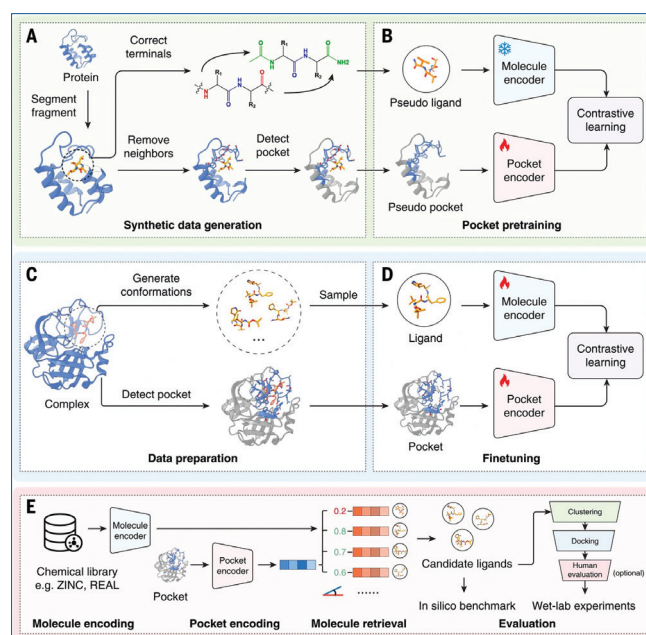


Fig. 2



Claudio Della Volpe  
UNITN, SCI, ASPO-ITALIA  
claudio.dellavolpe@unitn.it

## IL CIBO ULTRAPROCESSATO FA MALE

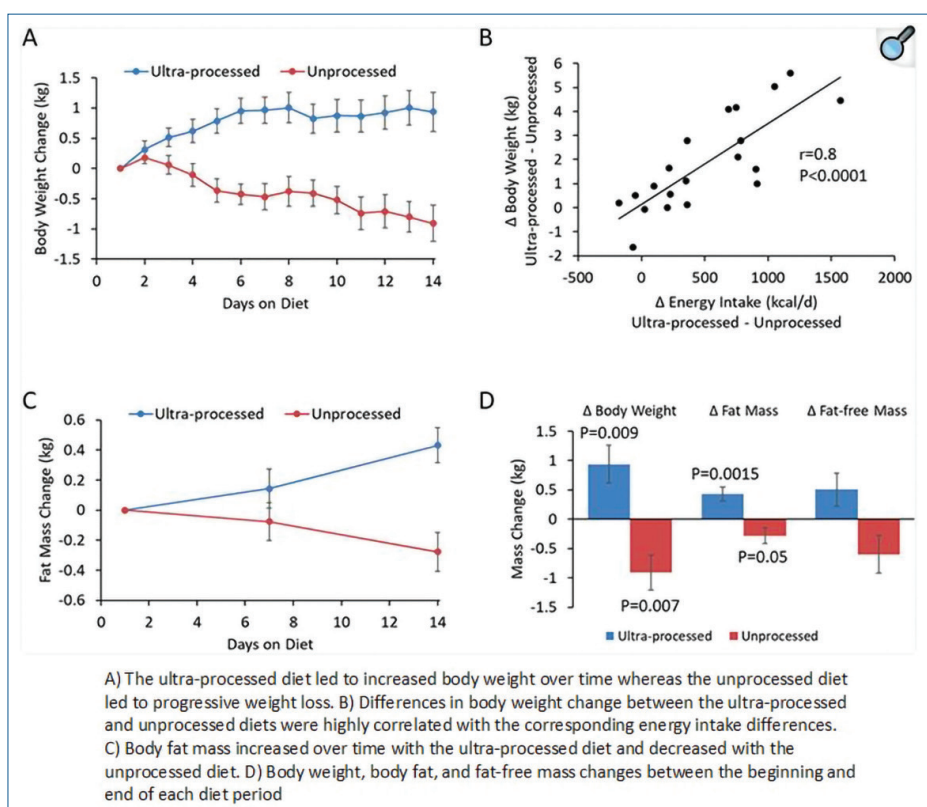


gono una lunga lista di ingredienti (da cinque in su) di cui molti sono additivi artificiali (coloranti, emulsionanti, edulcoranti o addensanti) usati allo scopo di esaltarne i sapori e renderne più gradevole la consistenza (fonte <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/31105044/>).

Esistono definizioni molto precise di cibo ultraprocesso (UPF) per esempio nell'articolo di Monteiro ed altri che si richiama alla lista denominata NOVA. Dicono gli autori: "Un modo pratico per identificare un prodotto ultra-processato è quello di verificare se il suo elenco di ingredienti contiene almeno un elemento caratteristico del gruppo di alimenti ultra-trasformati NOVA, vale a dire sostanze alimentari mai o raramente utilizzate in cucina (come lo sciroppo di mais ad alto contenuto di fruttosio, oli idrogenati o interesterificati e proteine idrolizzate),

Sia l'ultimo numero di *The Lancet* che un recente rapporto dell'Istituto Ricerche Mario Negri condannano senza scampo il cibo ultraprocesso.

Cosa è il cibo ultraprocesso e come c'entra la chimica? Importante una definizione chiara, altrimenti si potrebbe capire che tutti i cibi processati dall'industria sono classificabili come ultraprocessati, UPF; ma non è assolutamente così, molti processi chimici applicati al cibo sono fondamentali, ma un loro eccesso no. Sono "cibi ultra-processati" (UPF) tutti quegli alimenti confezionati che hanno subito diversi (NdA: nel senso di numerosi e differenti fra di loro) processi di trasformazione industriale. Processi che possono modellare, sottrarre o aggiungere sostanze, raffinare, modificare la struttura dei cibi fino a trasformarli nei prodotti confezionati che appaiono sulle nostre tavole. I cibi ultra-processati conten-





oppure classi di additivi progettati per rendere il prodotto finale appetibile o più attraente (come aromi, esaltatori di sapidità, coloranti, emulsionanti, sali emulsionanti, dolcificanti, addensanti e agenti antischiUMA, di carica, carbonatanti, schiumogeni, gelificanti e agenti di rivestimento)".

Proprio il 1° aprile di quest'anno si conclude il decennio dedicato dalla Nazioni Unite alla nutrizione, come parte degli obiettivi della Sostenibilità; in occasione di questa iniziativa è stato pubblicato un testo che racchiude **i principi generali di guida per una nutrizione adeguata**, nell'ambito dei quali è stata introdotta la lista NOVA.

Tra le evidenze più importanti emerse dallo studio di Hall (citato per primo) il fatto che *la densità energetica dei cibi ultra-processati sia un fattore chiave nel loro impatto sull'aumento di peso (e sulla salute)*: gli UPF (esclusi i liquidi) hanno una densità di circa 2,15 kcal per grammo, quasi il doppio rispetto agli alimenti non o minimamente trasformati, che ne contengono circa 1,15 (Fig. 1).

Mentre è chiaro che una dieta con troppi UPF è povera di cibi naturali, è meno chiaro cosa aggiungano ahimè i processi chimici *troppo numerosi*. Gli UPF sono fortemente influenzati dalla chimica attraverso la loro formulazione industriale, che utilizza additivi, emulsionanti, aromi e coadiuvanti tecnologici che alterano chimicamente gli ingredienti, causando disturbi metabolici, infiammazioni, alterazioni del microbioma intestinale e potenziali interferenze ormonali (disturbi endocrini), con ripercussioni sulla chimica cerebrale (dipendenza) e sulla salute generale attraverso la lisciviazione chimica dalla plastica. La relazione è bidirezionale: gli UPF creano esposizioni chimiche dannose nell'organismo e sono collegati a malattie croniche attraverso il loro complesso impatto biochimico.

#### ESEMPI

- |   |   |
|---|---|
| • snack confezionati grassi, dolci, salati o salati   | • carne, pesce e verdure preconfezionati (confezionati)   |
| • biscotti  | • pizza e primi piatti pronti   |
| • gelati e dessert surgelati  | • hamburger precotti, hot dog, salsicce   |
| • cioccolatini, caramelle e dolci in generale   | • nuggets e bastoncini di pollo e pesce precotti  |
| • cola, soda e altre bevande gassate  | • altri prodotti di origine animale ottenuti da scarti  |
| • bevande "energetiche" e sportive  | • pane confezionato, panini per hamburger e hot dog   |
| • zuppe, noodles, salse, dessert, miscele per bevande e condimenti in scatola, confezionati, disidratati (in polvere) e altri prodotti "istantanei" | • prodotti da forno realizzati con ingredienti quali grassi vegetali idrogenati, zucchero, lievito, siero di latte, emulsionanti e altri additivi |
| • yogurt zuccherati e aromatizzati, compresi gli yogurt alla frutta   | • cereali e barrette per la colazione   |
| • bevande a base di latte, compresi il latte al cioccolato  | • formule e bevande per l'infanzia e frullati sostitutivi dei pasti (ad es. "slim fast")  |
| • succhi zuccherati   | • pasticcini, torte e preparati per torte   |
| • margarina e creme spalmabili  | • bevande alcoliche distillate come whisky, gin, rum, vodka, ecc.   |

Fig. 2 - Da [4]

Composizione chimica e lavorazione fanno la differenza.

•Frazionamento e modifica: gli alimenti integrali vengono scomposti (frazionati) e alterati chimicamente (ad esempio, idrogenazione) in sostanze come sciroppo di mais ad alto contenuto di fruttosio, proteine isolate e amidi modificati.

•Additivi: emulsionanti, stabilizzanti, coloranti artificiali, aromi e conservanti vengono aggiunti per migliorare la consistenza, il gusto e la durata di conservazione, agendo come sostanze chimiche industriali.

•Tecniche industriali: l'estrusione, lo stampaggio e la frittura ad alta temperatura creano nuovi composti chimici, come i prodotti della reazione di Maillard, che influenzano il sapore e la doratura.

In sostanza, gli UPF sono caratterizzati da un'ampia manipolazione chimica, che introduce una va-



## Sono UPF:

- barrette ai cereali, barrette sostitutive dei pasti
- fiocchi di mais glassati e alcuni cereali zuccherati per la colazione
- pane in cassetta confezionato (anche se integrale)
- yogurt (anche magri) alla frutta zuccherati e aromatizzati
- purè di patate istantaneo, polenta istantanea
- sughi pronti
- crackers
- chips legumi
- zuppe o minestre istantanee
- succhi di frutta industriali
- vegan burger o simili
- gallette di riso
- fette biscottate
- alcuni omogeneizzati

## NON SONO UPF:

- frutta, verdura e legumi in scatola
- formaggi
- pane
- pesce in scatola
- bevande alcoliche come vino e birra

### Riduciamo i cibi UPF nella nostra dieta

Fig. 3 - Da [6]

sta gamma di sostanze chimiche non alimentari e composti naturali alterati che alterano la biochimica umana e la salute a lungo termine, secondo il **National Institutes of Health (.gov)**.

Mentre molti di noi discutevano o si accapigliavano sul sì e no alla dieta mediterranea o sulla piramide alimentare i cibi ultraprocesati entravano e conquistavano il mercato del cibo anche familiare con effetti potenzialmente distruttivi specie sulla salute dei piccoli e degli anziani. Il sistema NOVA classifica i cibi in 4 gruppi e i cibi UPF costituiscono il 4 gruppo; estraiamo la lista originale del 4 gruppo dal documento (Fig. 2).

Ma anche alimenti “insospettabili” spesso consigliati dai nutrizionisti nelle diete o pubblicizzati come sani e naturali. Si tratta di alimenti poveri di calorie, certo, ma comunque non sani perché hanno subito *lunghe e ripetute lavorazioni industriali* (Fig. 3).

Riduciamo i cibi UPF nella nostra dieta.

*“Un consiglio che possiamo dare per ridurre il consumo di cibi ultra-processati - afferma Carlotta Franchi, responsabile del Laboratorio di Farmacoepidemiologia e Nutrizione Umana dell'Istituto Mario Negri - è quello di imparare a leggere con attenzione le etichette alimentari per fare acquisti consapevoli. È importante cercare di riempire il carrello della propria spesa prevalentemente con cibi freschi o minimamente processati come frut-*

*ta, verdura, cereali integrali, legumi, pesce e carne magra, da cucinare a casa. È anche importante imparare a pianificare i pasti, così da non trovarsi a dover ricorrere a soluzioni rapide e poco salutari, al di fuori dell'ambiente domestico. Inoltre iniziare a fare piccoli cambiamenti, come sostituire uno snack confezionato con della frutta o uno yogurt naturale, può fare una grande differenza nel tempo. E per le mamme è importante adottare ed educare i loro bambini ad uno stile alimentare sano fin dai primi mesi di vita, in modo da non trascinare abitudini scorrette negli anni a venire.”*

## BIBLIOGRAFIA

- [1] <https://www.airc.it/news/i-cibi-ultraprocessati-finiscono-ancora-sotto-processo>
- [2] <https://publichealth.jhu.edu/2025/what-are-ultra-processed-foods>
- [3] <https://www.theguardian.com/food/2023/sep/06/ultra-processed-foods-the-19-things-everyone-needs-to-know>
- [4] <https://ecuphysicians.ecu.edu/wp-content/pv-uploads/sites/78/2021/07/NOVA-Classification-Reference-Sheet.pdf>
- [5] <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11575809/>
- [6] <https://www.marionegri.it/magazine/cibi-ultra-processati-quali-sono>



## NON IDEALITÀ E PRESTAZIONI IN REATTORI TUBOLARI

*Questa nota tratta l'effetto delle non idealità sulle prestazioni di reattori tubolari per reazioni di interesse chimico-industriale. Prendendo a riferimento un modello ideale (PFR), vengono presentate le possibili deviazioni dall'idealità che conducono al concetto di reattore a dispersione assiale. La tematica viene trattata con relazione al caso studio della termolisi del protossido di azoto.*

### Il reattore tubolare ideale (PFR) e le possibili deviazioni dall'idealità

Prendiamo in esame una reazione chimica che evolva in condizioni isoterme (e isobare) in fase omogenea, definendo "A" il reagente limitante. Assumiamo che la miscela reagente non subisca significative variazioni di densità durante il processo. In condizioni ideali, se la reazione è condotta in un reattore tubolare continuo e stazionario, l'approccio più semplice fa riferimento al modello del Reattore in Flusso a Pistone (PFR; Fig. 1). Dal versante fluidodinamico, flusso a pistone implica condizioni di perfetta segregazione assiale degli elementi di fluido (e.d.f.): gli e.d.f. che si trovano a diversi valori dell'asse  $z$  (la direzione principale del moto) non interagiscono tra loro (non si verificano cioè retro-miscelazione, fenomeni diffusivi, vortici, ecc. lungo l'asse, dove invece prevalgono i moti convettivi). Ogni e.d.f. manterrà quindi le sue proprietà intensive (in particolare, nel nostro caso, il suo grado di conversione  $x_A$ ), senza mescolarsi con gli e.d.f. che si trovano "prima" o "dopo", lungo  $z$ . Inoltre, in un PFR si postulano condizioni di perfetta miscelazione radiale: e.d.f. che si trovano allo stesso valore di  $z$ , ma a diverse quote radiali, sono indistinguibili nelle loro proprietà intensive (hanno lo stesso valore di  $x_A$ ). In aggiunta, essi sono caratterizzati dalla stessa componente assiale del vettore velocità (il profilo di velocità è piatto da parete a parete).

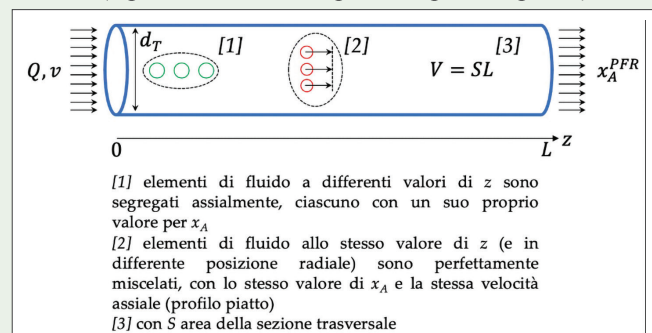


Fig. 1 - Illustrazione schematica di un PFR, con le principali caratteristiche fluidodinamiche

Le ipotesi del PFR implicano che ogni e.d.f. in ingresso abbia lo stesso tempo di residenza all'interno del sistema (detto a volte anche "tempo-spazio"), definito dall'Eq. (1), dato dal rapporto tra la lunghezza del reattore,  $L$ , e la velocità (media),  $v$  (le equazioni sono elencate in Tab. 1). Moltiplicando entrambe le grandezze per l'area  $S$  della sezione trasversale del PFR, e ricordando che il prodotto tra velocità e sezione restituisce  $Q$  [volume/tempo], la portata volumetrica circolante nel reattore, notiamo in Eq. (1) che il tempo-spazio può equivalentemente esprimersi come il rapporto tra il volume del reattore ( $V$ ) e  $Q$ . Per legge cinetica lineare nella concentrazione del reagente limitante (governata da costante cinetica  $k$  [1/tempo]), la letteratura [1] riporta, Eq. (2), la soluzione per l'equazione di progetto del PFR (derivante dall'applicazione del bilancio di materia), dove il numero di Damköhler ( $Da$ ) in Eq. (3) rappresenta il rap-

$$\tau = \frac{L}{v} = \frac{LS}{vS} = \frac{V}{Q} \quad (1)$$

$$x_A^{PFR} = 1 - \exp(-Da) \quad (2)$$

$$Da = k\tau \quad (3)$$

$$t_d = \frac{L^2}{D_{ax}} \quad (4)$$

$$Pe = \frac{t_d}{\tau} = \frac{\frac{L^2}{D_{ax}}}{\frac{L}{v}} = \frac{Lv}{D_{ax}} \quad (5)$$

$$x_A^{ADR} = 1 - C_1 \exp(\lambda_1) - C_2 \exp(\lambda_2) \quad (6)$$

$$\begin{cases} C_1 = -\frac{\lambda_2 \exp(\lambda_2)}{\lambda_1 \exp(\lambda_1) - \lambda_2 \exp(\lambda_2)} \\ C_2 = \frac{\lambda_1 \exp(\lambda_1)}{\lambda_1 \exp(\lambda_1) - \lambda_2 \exp(\lambda_2)} \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4DaPe}}{2} \\ \lambda_2 = \frac{Pe - \sqrt{Pe^2 + 4DaPe}}{2} \end{cases} \quad (8)$$

$$D_{ax} = D_m + \frac{(d_r v)^2}{192 D_m} \quad (9)$$

Tab. 1 - Equazioni di riferimento

porto tra tempo di residenza ( $\tau$ ) e tempo caratteristico della reazione chimica ( $=1/k$  nel nostro caso), ed ha ordine di grandezza tipicamente unitario per reattori ben dimensionati. Pertanto, l'Eq. (2) restituisce una relazione biunivoca tra tempo-spazio (che tiene conto di volume e portata volumetrica) e grado di conversione atteso.

Lungo l'asse di un PFR, si escludono quindi situazioni non ideali quali, ad esempio, retro-miscelazione, fenomeni diffusivi, vortici. Queste non idealità sono condensate in un coefficiente di dispersione assiale,  $\mathcal{D}_{ax}$  [lunghezza<sup>2</sup>/tempo]. Approfondimenti sul calcolo di questo coefficiente sono presentati in Appendice. Il tempo caratteristico che descrive l'occorrenza di tali fenomeni non ideali ha ordine di grandezza espresso in Eq. (4). Definiamo ora il numero di Péclet come il rapporto tra  $t_d$  e il tempo di residenza degli e.d.f., Eq. (5). In un PFR, le condizioni di idealità impongono  $\mathcal{D}_{ax}=0$  e  $Pe \rightarrow \infty$ , che equivale a vedere il tempo caratteristico dei fenomeni dispersivi così tanto più lungo del tempo di residenza, che tali fenomeni non interesseranno gli e.d.f. nella loro permanenza nel reattore.

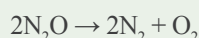
## Il reattore a dispersione assiale (ADR)

Se le condizioni di idealità (PFR) in un reattore tubolare non sono rispettate, si può fare riferimento al Reattore a Dispersione Assiale (ADR). Questo modello aggiunge, rispetto al PFR, i fenomeni dispersivi tenuti in conto da  $\mathcal{D}_{ax}$  (stavolta non più trascurabile).

Per legge cinetica lineare, la soluzione per l'equazione di progetto dell'ADR è [1] in Eq. (6), dove le due costanti valgono le relazioni in Eq. (7), poste le espressioni in Eq. (8) per  $\lambda_{1,2}$ . L'Eq. (6), così come l'Eq. (2), riporta una relazione biunivoca tra tempo-spazio (presente in  $Pe$  e  $Da$ ) e grado di conversione. Ci chiediamo ora come si possano comparare le prestazioni attese in un ADR rispetto al caso ideale del PFR. La questione è discussa con l'aiuto della Fig. 2, dove il rapporto tra i due gradi di conversione (rispettivamente, Eqs. (6) e (2)) è riportato in funzione di  $Da$  (Eq. (3)), con curve parametriche in  $Pe$  (Eq. (5)). Fissato  $Da$ , minore è  $Pe$  e maggiore è lo scostamento rispetto al caso ideale di PFR (per cui, virtualmente,  $Pe \rightarrow \infty$ ). Si può anche osservare che, per una curva iso-Péclet, l'aumento di  $Da$  (quindi, del tempo di residenza) funge da smorzatore delle differenze: infatti, in questo caso tutti gli e.d.f., pur in presenza di backmixing, hanno tempo sufficiente per reagire, e questo toglie peso agli scostamenti dall'idealità. In conclusione, resta il dato di fatto che il rapporto in ordinata è sempre  $<1$ , pertanto il PFR è un modello che tende a sovrastimare le prestazioni d'impianto: la verifica dell'applicabilità delle ipotesi di PFR va fatta (trattiamo la questione a seguire), per evitare di incorrere in valutazioni troppo ottimistiche circa il grado di conversione atteso.

## Caso studio della termolisi omogenea del protossido di azoto

Consideriamo la termolisi in fase gassosa del protossido di azoto [2]:



Questo caso studio è qui preso in esame per il suo elevato livello di maturità tecnologica (TRL) e può essere pensato come di rilievo per la decomposizione di  $\text{N}_2\text{O}$  nel processo di produzione dell'acido nitrico (in cui  $\text{N}_2\text{O}$  appare come sottoprodotto), per dare un esempio [3].

Per lo sviluppo di questo caso studio, prenderemo valori numerici finalizzati alla discussione di alcuni aspetti generali. Sia la reazione condotta a temperatura (1100 K) tale da poterla assumere irreversibile. Per tempi di residenza sufficientemente brevi (ordine del secondo), queste condizioni consentono di trascurare l'insorgenza di reazioni indesiderate, e la nostra reazione può descriversi mediante cinetica lineare [4] nella concentrazione di  $\text{N}_2\text{O}$  ("A"), con  $k=1,5$  1/s a pressione atmosferica.

In uno schema di processo in cui  $\text{N}_2\text{O}$  sia da abbattere a valle dello stadio di conversione di  $\text{NH}_3$  in  $\text{NO}$ , ci attendiamo una corrente sufficientemente diluita nel reagente A (ipotizziamo 0,3% in volume per  $\text{N}_2\text{O}$ , con resto - ossia  $\text{N}_2$  più altri - da considerarsi inerte ai fini della reazione in esame) da poter trascurare sia gli effetti di esotermicità della reazione (sistema isoterma) che le variazioni di densità connesse alla variazione del numero di moli nel corso della nostra reazione.

I dati dell'esempio sono riassunti in Tab. 2. Consideriamo una unità elementare (reattore di abbattimento, da moltiplicarsi ad

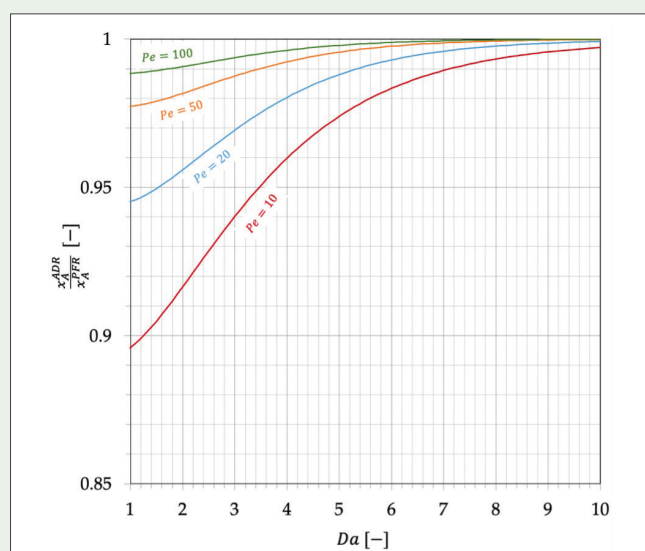


Fig. 2 - Rapporto tra grado di conversione in ADR e PFR in funzione dei numeri di Damköhler (Eq. (3)) e Péclet (Eq. (6)), per cinetica lineare



$T$	1100 K	$Da$	1	$Pe$ (Eq. (6))	20
$k$	1.5 1/s	$\tau$ (Eq. (3))	2/3 s	$\lambda_1$ (Eq. (9))	20.95
$L$	10 m	$v$ (Eq. (1))	15 m/s	$\lambda_2$ (Eq. (9))	-0.95
$d_r$	0.025 m	$Q$ (Eq. (1))	$7.36 \cdot 10^{-3}$ m <sup>3</sup> /s	$C_1$ (Eq. (8))	$1.39 \cdot 10^{-11}$
$S$	$4.9 \cdot 10^{-4}$ m <sup>2</sup>	$\mathcal{D}_m$	$10^{-4}$ m <sup>2</sup> /s	$C_2$ (Eq. (8))	1
$V$	$4.9 \cdot 10^{-3}$ m <sup>3</sup>	$\mathcal{D}_{ax}$ (Eq. (4))	7.3 m <sup>2</sup> /s	$x_A^{ADR}$ (Eq. (7))	0.597
				$x_A^{PFR}$ (Eq. (2))	0.632
				$x_A^{ADR}/x_A^{PFR}$	0.945

Tab. 2 - Dati caratteristici per il caso studio della termolisi di N<sub>2</sub>O (caso-base di  $Da=1$ )

es. in parallelo a seconda della potenzialità del processo), costituita da un reattore tubolare di geometria nota ( $L=10$  m;  $d_r=2,5$  cm). Ciò consente di conoscere la sezione trasversale  $S=4,9 \cdot 10^{-4}$  m<sup>2</sup> e il volume  $V=4,9 \cdot 10^{-3}$  m<sup>3</sup>. In questo reattore di circa 5 L, imponiamo il criterio di progettazione  $Da=1$  per cui, Eq. (3), risulta  $\tau=Da/k=2/3$  s. Usando l'Eq. (1), è  $v=L/\tau=15$  m/s che restituisce una portata volumetrica in ingresso al reattore pari a  $Q=vS=7,36 \cdot 10^{-3}$  m<sup>3</sup>/s. Questa portata di circa 7 L/s (alle condizioni di processo), contenente N<sub>2</sub>O inerte, viene elaborata nel nostro reattore tubolare in cui il coefficiente di dispersione assiale, Eq. (9) in Appendice, risulta  $\mathcal{D}_{ax}=7,3$  m<sup>2</sup>/s se la diffusività molecolare in fase gassosa a 1100 K è assunta pari a  $\mathcal{D}_m=10^{-4}$  m<sup>2</sup>/s. La valutazione del numero di Péclet, Eq. (5), restituisce un valore di ca. 20 (usato nei calcoli in Tab. 2). L'importante risultato, qui, è che il sistema non può essere trattato correttamente come un PFR. Con un tempo caratteristico di dispersione assiale pari a 20 volte il tempo di permanenza degli e.d.f. nel reattore, il sistema può però essere risolto considerando il modello ADR. L'applicazione delle Eqs. (2) e (6) fornisce, rispettivamente,  $x_A^{PFR}=0,632$  e  $x_A^{ADR}=0,597$ : come si osserva in Fig. 2, per  $Da=1$  e  $Pe=20$ , il rapporto in ordinata vale 0,945; nel caso concreto, assumere PFR, invece di considerare compiutamente gli effetti delle non idealità sulle prestazioni del reattore tubolare, determina una sovrastima del grado di conversione (+5,9% in valore relativo; +3,5% in valore assoluto), con conseguenti ricadute sui valori di produttività d'impianto (che, nel nostro caso, si traduce in efficacia di abbattimento di N<sub>2</sub>O).

### Osservazioni ed estensioni

Lo schema presentato può pertanto vedersi come uno stadio di abbattimento primario rispetto al valore di 3000 ppm di N<sub>2</sub>O in ingresso. Infatti, specifiche più stringenti richiederebbero gradi di abbattimento nell'ordine di almeno il 70%. Per approfondire questo aspetto, come si è già osservato in Fig. 2, ricordiamo che modifiche in termini di aumento sia di  $Da$  che di  $Pe$  consentono di avvicinare le prestazioni del reattore ADR a quelle del modello ideale (PFR), considerando inoltre che gli aumenti nel numero di Damköhler sono per se fondamentali al fine di incrementare il grado di conversione. Volendo mantenere fissa la temperatura e la geometria del reattore, per migliorare le prestazioni proponiamo un caso in cui  $Da$  sia raddoppiato ( $Da=2$ ) rispetto al valore precedente. Per PFR (reattore ideale), risulta

$T$	1100 K	$Da$	2	$Pe$ (Eq. (6))	40
$k$	1.5 1/s	$\tau$ (Eq. (3))	1.33 s	$\lambda_1$ (Eq. (9))	41.91
$L$	10 m	$v$ (Eq. (1))	7.5 m/s	$\lambda_2$ (Eq. (9))	-1.91
$d_r$	0.025 m	$Q$ (Eq. (1))	$3.68 \cdot 10^{-3}$ m <sup>3</sup> /s	$C_1$ (Eq. (8))	$4.25 \cdot 10^{-21}$
$S$	$4.9 \cdot 10^{-4}$ m <sup>2</sup>	$\mathcal{D}_m$	$10^{-4}$ m <sup>2</sup> /s	$C_2$ (Eq. (8))	1
$V$	$4.9 \cdot 10^{-3}$ m <sup>3</sup>	$\mathcal{D}_{ax}$ (Eq. (4))	1.8 m <sup>2</sup> /s	$x_A^{ADR}$ (Eq. (7))	0.845
				$x_A^{PFR}$ (Eq. (2))	0.865
				$x_A^{ADR}/x_A^{PFR}$	0.978

Tab. 3 - Dati caratteristici per il caso studio della termolisi di N<sub>2</sub>O (caso modificato con  $Da=2$ )

ora  $x_A^{PFR}=0,865$ . I risultati sono riportati in Tab. 3. Raddoppiare il numero di Damköhler significa, nei fatti, raddoppiare il tempo di residenza medio ( $\tau$ ), che si traduce nel dimezzamento della velocità e, quindi, della portata  $Q$ . La diminuzione di  $v$  implica una diminuzione nel coefficiente di dispersione assiale, che mostra una dipendenza "ripida" dalla velocità come ci istruisce la discussione in Appendice. Ciò fa sì che, al netto, diminuzioni in velocità determinino aumenti nel numero di Péclet (Eq. (5)), nel senso che diminuiscono le occasioni, per gli e.d.f., di spostarsi tra linee di flusso a differente quota radiale, riducendo gli effetti di non idealità (naturalmente, evitando di abbassare troppo la velocità, altrimenti incorreremmo in fenomeni di moto laminare, per cui bisognerebbe adottare altri modelli reattoristici). Il numero di  $Pe$  vale qui ca. 40, e  $x_A^{ADR}=0,845$ : come si osserva in Fig. 2, per  $Da=2$  e  $Pe=40$ , il rapporto in ordinata vale 0,978. Notiamo quindi come i due comportamenti reattoristici ora si stiano avvicinando, e come un leggero sovradimensionamento ( $Da=2$  vs. 1) abbia permesso di raggiungere gradi di abbattimento di ca. 85% (vs. 60%). Naturalmente, ciò è fatto a spese del dimezzamento della portata da trattare a parità di temperatura e geometria, che chiama (ad es.) ad un raddoppio del numero di tubolari da porre in parallelo per elaborare l'intera portata in gioco.

### APPENDICE:

#### COEFFICIENTE DI DISPERSIONE ASSIALE

Il coefficiente di dispersione assiale,  $\mathcal{D}_{ax}$ , ha le stesse dimensioni di una diffusività molecolare degli e.d.f.,  $\mathcal{D}_m$ , ed è ad essa legato da relazioni di letteratura che comprendono geometria del sistema e velocità, come ad es. in Eq. (9), dove  $d_r$  è il diametro del condotto tubolare.

Il coefficiente di dispersione assiale entra nel modello ADR che, va detto, è valido solo se  $Pe$ , Eq. (5), si mantiene sufficientemente elevato (ad es.,  $Pe$  almeno pari a 10), a significare che i fenomeni che fanno discostare il sistema da un PFR sono (sia pur non più trascurabili) di minore rilevanza rispetto ai moti convettivi (dominati dalla velocità  $v$ ).

### BIBLIOGRAFIA

- [1] O. Levenspiel, Chemical Reaction Engineering, J. Wiley & Sons, New York, 1999.
- [2] X. Wu, J. Du *et al.*, *Chem. Soc. Rev.*, 2024, **53**, 8379.
- [3] J. Pérez-Ramírez, F. Kapteijn *et al.*, *Appl. Cat. B Environ.*, 2003, **44**, 117.
- [4] A. Karabeyoglu, J. Dyer *et al.*, *Proc. AIAA*, 2008.



# Insieme, accendiamo l'innovazione.

**Entra in SCI**

La voce della Chimica in Italia.

