

REGIONE EMILIA ROMAGNA:  
BORSE DI DOTTORATO IN CHIMICA DELLO STATO SOLIDO E COMPUTAZIONALE

La regione Emilia Romagna, Consorzio SPINNER, ha selezionato 9 **progetti di ricerca** relativi a **tematiche strategiche per il territorio regionale** in considerazione dei fabbisogni di competenze qualificate delle imprese e del sistema economico territoriale e li **ha finanziati con borse di dottorato per il XXVII Ciclo**.

Il **progetto di ricerca** dal titolo "**Ottimizzazione delle forme molecolari e cristalline di farmaci, fitofarmaci, pesticidi in relazione ad attività, biodisponibilità, aspetti brevettuali, e alla produzione di polimorfi, solvati e co-cristalli con metodi a basso impatto ambientale**", elaborato in collaborazione da gruppi di ricerca dell'Università di Parma, Modena e Reggio, Bologna, e Ferrara ha ricevuto 4 borse che verranno bandite una per sede.

Le competenze che verranno fornite ad ogni dottorando in una **stretta collaborazione tra i gruppi di ricerca** delle quattro sedi hanno l'obiettivo di formare giovani altamente qualificati nella ricerca, incrementando in maniera significativa le loro **opportunità di inserimento lavorativo** in settori tecnologicamente avanzati, presenti anche sul territorio regionale. Oltre al nucleo fondante di solide basi finalizzate a dare strumenti per produrre innovazione, vanno sottolineate le **competenze trasversali**, immediatamente spendibili dal punto di vista professionale e altamente richieste dal mercato del lavoro.

**Questo progetto si distingue per l'approccio estremamente innovativo di interazione tra Regione, Industria e Accademia che sta alla base del finanziamento, e costituisce una grande opportunità per laureati altamente motivati e desiderosi di interagire con il mondo del lavoro.**

Per ulteriori info:

**Referente del Progetto:**

Alessia Bacchi, Università di Parma, Dipartimento di Chimica GIAF,  
e-mail: [alessia.bacchi@unipr.it](mailto:alessia.bacchi@unipr.it)

**Referenti delle sedi:**

Fabrizia Grepioni, Università di Bologna, Dipartimento di Chimica 'G. Ciamician'  
e-mail: [fabrizia.grepioni@unibo.it](mailto:fabrizia.grepioni@unibo.it)

Paola Gilli, Università di Ferrara, Dipartimento di Chimica  
e-mail: [paola.gilli@unife.it](mailto:paola.gilli@unife.it)

Maria Cristina Menziani, Università di Modena e Reggio Emilia, Dipartimento di Chimica  
e-mail: [menziani@unimore.it](mailto:menziani@unimore.it)

**Le domande di ammissione dovranno essere compilate seguendo le indicazioni dei singoli atenei.**

Segue una breve descrizione delle tematiche affrontate dai quattro progetti locali.

## **UNIPR**

*Titolo provvisorio:* Progettazione e sintesi di nuove forme cristalline di molecole di interesse farmaceutico: polimorfi, solvati, co-cristalli e complessi con metalli biologicamente attivi

*Finalità:* Il progetto prevede il design e lo studio di nuove forme solide di farmaci con particolare enfasi sulla complessazione di farmaci con metalli bioattivi e conseguente screening di polimorfi, solvati e co-cristalli dei complessi metallici. Verrà dato rilievo allo sviluppo di metodi non convenzionali di preparazione delle fasi solide, quali i metodi meccanochimici, particolarmente indicati per il basso impatto ambientale che comportano, e la conversione tra polimorfi, l'ottenimento di fasi solvate mediante scambi solido-vapore, i processi di desolvatazione. Verranno formulati modelli meccanicistici per descrivere i processi di trasformazione solido-solido. Saranno infine sviluppati protocolli di cristallizzazione e controllo della morfologia cristallina mediante tecniche da soluzione e da gel.

*Formazione di base:* Non sono richieste conoscenze preliminari in ambito cristallografico. Durante il corso di dottorato verranno acquisite competenze nel campo della sintesi di complessi metallici, degli esperimenti di gas uptake, della diffrazione di raggi X su cristallo singolo e su polveri a temperatura variabile, risoluzione di strutture da diffrazione di polveri, tecniche calorimetriche, tecniche di data mining su banche dati cristallografiche. Verranno acquisiti inoltre i fondamenti delle teorie della nucleazione e crescita di cristalli e le principali tecniche associate.

Il bando verrà annunciato sul sito web di Ateneo:

<http://www.unipr.it/pagina/dottorati-di-ricerca-88403>

Data presunta di pubblicazione del bando: Ottobre 2011

Data presunta di scadenza del bando: Novembre 2011

## **UNIBO**

*Titolo provvisorio:* Screening e sintesi di nuove forme cristalline (co-cristalli molecolari e ionici, solvati/idrati, polimorfi) di farmaci, fitofarmaci e pesticidi.

*Finalità:* Il progetto prevede (i) l'applicazione di tecniche di green-chemistry (reazioni in solido e solvent-free), (ii) lo studio della stabilità termodinamica dei componenti o aggregati molecolari (tecniche calorimetriche e di diffrazione a temperatura variabile) e (iii) la caratterizzazione delle forme ottenute tramite diffrazione di raggi X da cristallo singolo e da polveri. Verrà dato ampio risalto alla determinazione strutturale da polveri, tecnica di avanguardia nel campo dello stato solido. Saranno inoltre possibili stages in aziende che si occupano di problemi di stato solido di interesse industriale.

*Formazione di base:* Non sono richieste conoscenze preliminari di stato solido o di cristallografia. Tali conoscenze verranno apprese nel corso del dottorato. Il/la dottorando/a imparerà ad utilizzare strumentazione di ricerca avanzata per quanto riguarda la diffrazione di raggi X da cristallo singolo e da polveri e l'analisi termica (DSC, TGA, microscopia ottica con piatto riscaldante); imparerà inoltre i principali metodi di sintesi solvent-free o in solido (grinding, kneading, vapour digestion) utili allo studio e allo screening di forme molecolari. Utilizzerà anche dati cristallografiche e utilizzerà i principali programmi di descrizione grafica.

Il secondo bando di ammissione ai corsi di Dottorato XXVII ciclo (a.a. 2011/2012) è reperibile sul sito web di Ateneo:

<http://www.unibo.it/Portale/Offerta+formativa/Dottorati+di+ricerca/default.htm>

Scuola di dottorato in Scienze Chimiche

Nuova data di scadenza del bando: 20 Settembre 2011

## **UNIFE**

*Titolo provvisorio:* Legame ad idrogeno, legame ad alogeno e interazioni di trasferimento di carica come forze di aggregazione nei cristalli e co-cristalli molecolari, nei materiali funzionali e nelle interazioni farmaco-recettore.

*Finalità:* Il progetto si prefigge di formare esperti nel campo delle forze intermolecolari che governano l'associazione delle molecole, senza il cui controllo ogni pianificazione (design) rimane puramente aleatoria per tutte le tecnologie chimiche supramolecolari ad alto valore aggiunto, dal farmaceutico-biomedicale ai materiali strutturali o funzionali avanzati. Il progetto è orientato verso una visione unificata delle interazioni molecolari in termini di teoria del legame chimico. La sperimentazione include uno spettro di tecniche integrate: preparativa di cristalli e co-cristalli molecolari, loro caratterizzazione strutturale e di fase per diffrazione di raggi X da monocristallo e da polveri eventualmente integrata da analisi spettroscopiche IR ed NMR; confronto con dati ottenuti da databases cristallografici e termodinamici; interpretazione teorica dei risultati sperimentali mediante simulazione quantomeccanica ab-initio e DFT di sistemi campione.

*Formazione di base:* Discreta pratica nel campo della manipolazione chimica; una discreta conoscenza dei principi di base della chimica fisica. Lo svolgimento della tesi richiede anche una conoscenza teorica e pratica della cristallografia strutturale a raggi X che potrà essere acquisita e/o perfezionata attraverso corsi dedicati svolti nel primo anno.

Il bando è reperibile sul sito web di Ateneo:

<http://www.unife.it/studenti/dottorato/concorsi/il-concorso-per-esami>

Scuola di dottorato in Scienze della Vita, della Salute e dell'Ambiente

Indirizzo di Scienze Chimiche

Data di scadenza del bando: 16 Settembre 2011

## **UNIMORE**

*Titolo:* Studio di nuove forme cristalline di molecole d'interesse farmaceutico ed agroalimentare tramite metodi computazionali e chemometrici.

*Finalità:* Il progetto si prefigge di formare esperti con specifiche conoscenze nell'ottimizzazione/sviluppo di procedure ed algoritmi per la simulazione, classificazione, caratterizzazione di cristalli molecolari e razionalizzazione quantitativa delle loro proprietà.

*Formazione di base:* Non sono richieste conoscenze preliminari specifiche, ma una buona preparazione di base. Le conoscenze specifiche verranno apprese tramite appositi corsi teorici e pratici svolti nel primo anno di dottorato.

Scuola di dottorato di riferimento: Modellistica, simulazione computazionale e caratterizzazione Multiscala per le scienze dei Materiali e della vita

Data di scadenza del bando: 27 ottobre 2011

Info alla pagina:

<http://www.unimore.it/didattica/dottorato.html?id=7>