

Scheda di Programma

Per l'attivazione nell'ambito del Corso di Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche del seguente Programma di ricerca, a valere sulle risorse di cui al DM n. 351/2022, relativamente alla seguente Misura:

M4C1- Inv. 3.4 "Didattica e competenze universitarie avanzate" → Dottorati dedicati alle transizioni digitali e ambientali.

M4C1- Inv. 4.1 "Estensione del numero di dottorati di ricerca e dottorati innovativi per la pubblica amministrazione e il patrimonio culturale". In particolare:

Dottorati PNRR

Dottorati per la Pubblica Amministrazione

(selezionare l'area/le aree CUN di riferimento del programma tra quelle di seguito indicate)

- Area 09 – Ingegneria industriale e dell'informazione
- Area 11 – Scienze storiche, filosofiche, pedagogiche e psicologiche
- Area 12 – Scienze giuridiche
- Area 13 – Scienze economiche e statistiche
- Area 14 – Scienze politiche e sociali

Dottorati per il patrimonio culturale

(selezionare l'area/le aree disciplinare/i e la tematica del programma tra quelle di seguito indicate)

- culturali
- Area 01 – Scienze matematiche e informatiche **Tematica** – Informatica, patrimonio e beni culturali
 - Area 02 – Scienze Fisiche **Tematica** – Fisica applicata al patrimonio culturale e ai beni culturali
 - Area 03 – Scienze chimiche **Tematica** – Chimica, ambiente, patrimonio e beni culturali
 - Area 04 Scienze della Terra **Tematica** – Georisorse minerarie per l'ambiente, il patrimonio e i beni culturali
 - Area 05 Scienze Biologiche **Tematica** - Ecologia, patrimonio e beni culturali
 - Area 08 – Ingegneria civile e Architettura **Tematiche** 1) Architettura, ambiente antropizzato, patrimonio e beni culturali 2) Architettura e paesaggio 3) storia dell'architettura; 4) Restauro; 5) Pianificazione e progettazione dell'ambiente antropizzato; 6) Design e progettazione tecnologica dell'architettura
 - Area 10 Scienze dell'antichità, filologico-letterarie e storico -artistiche **Tematiche** 1) Archeologia; 2) Storia dell'arte; 3) Media, patrimonio e beni culturali
 - Area 11 – Scienze storiche, filosofiche, pedagogiche, psicologiche **Tematiche** 1) Biblioteconomia; 2) Archivistica; 3) Storia del patrimonio e dei beni culturali 4) Paleografia; 5) Estetica; 6) Didattica dell'arte; 7) pedagogia dell'Arte
 - Area 12 - Scienze giuridiche **Tematica** Diritto del patrimonio culturale
 - Area 13 - Scienze Economiche e statistiche **Tematiche** 1) Economia della cultura e dell'arte 2) Economia e gestione delle imprese artistiche e culturali; 3) Statistica e Data Analytics per i beni culturali
 - Area 14 Scienze Politiche e sociali **Tematiche** 1) Sociologia dei beni culturali 2) sociologia dell'ambiente e del territorio

❖ **Titolo del Programma di ricerca:** Acid-base properties and selective sequestration of environmental and technological interest in aqueous solution.

❖ **Descrizione** (MAX 5000 CARATTERI SPAZI ESCLUSI):

The environmental and economic problems related to the intense use of particular elements (including many metals and metalloids) in many industrial and technological fields impose the need to develop new strategies for the remediation of polluted sites (e.g., seawater and other natural waters, sediments) and the recovery of some of these "critical" elements (the so-called TCE, Technologically Critical Elements) from different matrices in which they are contained (e.g., wastewaters, process waters). This possibility is closely related to the availability of accurate information on the components present in these matrices and the possibility of recognizing and quantifying them at ever lower concentration levels. At the same time, it is of fundamental importance to also know the distribution of possible species (speciation) that are formed in often chemically very complex systems such as real ones, characterized by a wide variability of chemical and physical conditions such as pH, temperature, concentration and ionic strength. In the case of metals and metalloids, these objectives also require knowledge not only of the interactions that occur with other components present in the matrices in which they are present, but also of their acid-base properties (hydrolysis of metal cations and protonation of inorganic anions such as molybdate, vanadate, etc.). This last aspect is of extreme importance, especially because, despite their importance, such data are not always available in the literature or are unreliable.

One of the objectives of this research project is therefore to undertake a systematic study aimed at defining the acid-base properties of elements of environmental and technological interest in aqueous solution (many real systems such as natural waters or industrial wastewaters are, in fact, multicomponent aqueous solutions), and the subsequent identification of a series of ligands (-O, -N, -S donors) with green and low-cost characteristics that have strong sequestering ability against these elements and, possibly, a high selectivity in a wide range of experimental conditions, through a thermodynamic approach. From the studies performed by different analytical techniques (e.g., potentiometry and other electrochemical techniques, spectrophotometric and spectrometric techniques, calorimetric techniques) it will be possible to obtain a series of thermodynamic parameters (stability constants, enthalpy changes, entropies, solubility products and activity coefficients) useful for the definition and modeling of the speciation of these elements in real systems.

The experimental conditions (pH, temperature, ionic strength, ionic medium) and the molecular descriptors (structural parameters, chemical-physical properties) of the best ligands in terms of selective sequestration of the elements studied in the systems of interest will be identified and modeled through multivariate analysis techniques. Modeling plays, in fact, a fundamental role in the transfer of knowledge from basic research to applications in the environmental field and / or other purely applicative sectors, since it can be very useful in the analysis of data matrices and in the optimization of processes. Both in speciation studies in complex matrices and in the case of selective sequestration processes, the formulation of predictive equations of the thermodynamic behavior of a given system according to the different conditions is of strategic importance for the reduction of costs and for the optimization of the aforementioned recovery processes.

The ultimate objective of the project will be the verification of the validity of the results obtained, in terms of accuracy of speciation models and efficacy of ligands in the selective sequestration of the elements studied, in real systems. To this end, the aforementioned studies will also be conducted and validated in multi-component aqueous solutions able to simulate the conditions of many of these systems (e.g., synthetic seawater) and, finally, will be tested on real matrices (e.g., natural waters, sediments, bioindicators). The latter aspect involves the sampling and the chemico-physical characterization of these matrices and, where necessary, the optimization of the strategies for the sequestration of toxic elements and / or recovery of TCE.

❖ **PERIODO IN IMPRESA – CENTRI DI RICERCA – P.A.:**

Il Programma di ricerca sarà svolto in collaborazione con il seguente soggetto:

Ragione sociale: Istituto per lo studio degli impatti Antropici e Sostenibilità in ambiente marino (IAS) – CNR. Sede Secondaria di Capo Granitola.

Sede legale: Via del Mare, 3 - Torretta Granitola, Campobello di Mazara (TP)-ITALY

Rappresentante legale: Marco Faimali

L'ente sopra citato ospiterà il dottorando beneficiario della borsa finanziata sulle risorse del DM 351/2022 per n. 6 mesi (**min 6 max 12**) nel corso del dottorato.

❖ **PERIODO ALL'ESTERO:**

Il Programma di ricerca prevede un periodo all'estero di n. 6 mesi (**min 6 max 18**) presso una delle seguenti istituzioni:

Instituto de Oceanografía y Cambio Global (IOCAG), Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (Spagna); Rosenstiel School of Marine and Atmospheric Science (RSMAS), University of Miami (USA).

Si dichiara inoltre che il presente programma è conforme al principio "di non arrecare un danno significativo" (DHS) ai sensi dell'art. 17 del regolamento (UE) 2020/852 in coerenza con gli orientamenti tecnici predisposti dalla Commissione Europea (Comunicazione della Commissione Europea 2021/C58/01) e garantisce il rispetto dei principi orizzontali del PNRR (contributo all'obiettivo climatico e digitale c.d. tagging, il principio della parità di genere e l'obbligo di protezione e valorizzazione dei giovani).