



a cura di Silvia Cauteruccio e Monica Civera

Dipartimento di Chimica

Università di Milano

silvia.cauteruccio@unimi.it

monica.civera@unimi.it

Soluzioni idrotropiche quali solventi ecosostenibili per il frazionamento delle biomasse vegetali

L'idrotropia, termine coniato da Carl Neuberg nel 1916 [C. Neuberg, *Biochem. Z.*, 1916, **76**, 107], indica il processo di solubilizzazione di molecole idrofobiche in acqua ad opera di grandi quantità di un secondo soluto, definito idrotropo [W. Kunz *et al.*, *Adv. Colloid Interface Sci.*, 2021, **294**, 102476]. Gli idrotropi sono generalmente composti organici anfifilici neutri o sotto forma di sali anionici o cationici, nei quali la parte idrofila e la parte idrofobica conferiscono a tali sostanze proprietà simili ai tensioattivi, dai quali si differenziano per la lunghezza della coda idrofobica, che risulta più corta negli idrotropi. Una sostanza idrotropa interagisce con la molecola idrofobica attraverso deboli interazioni di van der Waals, ma ad oggi il meccanismo dell'idrotropia non è del tutto chiaro, e diversi processi sono stati ipotizzati per spiegarne l'effetto solubilizzante, tra i quali la formazione di micelle e vescicole oppure attraverso un processo simile al *salting-in*. Le soluzioni idrotropiche sono una valida alternativa ai comuni solventi organici, ad esempio, per la solubilizzazione in acqua di farmaci idrofobici, essendo non infiammabili, a basso costo e non tossici. Più recentemente, numerosi studi sono stati condotti anche nel frazionamento della biomassa vegetale ad opera di idrotropi di natura ionica (benzoato e xilensolfonato di sodio), di natura acida (acido maleico, acido *p*-toluensolfonico *p*-TsOH) e di natura non ionica come il γ -valerolattone e l'urea [S. Jeong *et al.*, *Green Chem.*, 2024, DOI: [10.1039/d3gc03309k](https://doi.org/10.1039/d3gc03309k)]. La natura anfifilica degli idrotropi permette, infatti, il frazionamento

della biomassa lignocellulosica attraverso interazioni specifiche con i diversi composti idrofobi e idrofili che costituiscono la biomassa stessa, così da separare efficacemente la lignina dalla frazione ricca in cellulosa e migliorare, di conseguenza, la qualità e la quantità di lignina recuperata. In particolare, gli idrotropi acidi, oltre ad agire come solventi per la dissoluzione dei componenti *target* mediante fenomeni di aggregazione, agiscono anche da catalizzatori nella separazione della lignina e dall'emicellulosa, idrolizzando quest'ultima e depolimerizzando la lignina in molecole più piccole mediante processi più rapidi e condotti a temperature e/o pressioni non elevate. Infine, gli idrotropi acidi agiscono anche da agenti funzionalizzanti, andando a formare legami esterei con i gruppi alcolici dei componenti della lignina ed aumentandone di conseguenza l'idrofilicità e la solubilità (Fig. 1a) [C. Cai *et al.*, *Green Chem.*, 2020, **22**, 1605]. Recentemente questo approccio è stato applicato con successo nella formulazione di una crema solare contenente come additivo lignina stabilizzata, a sua volta ottenuta per trattamento di biomassa con una soluzione acquosa di *p*-TsOH quale agente estraente e successiva stabilizzazione con acido gliossilico (Fig. 1b) [Y. Fan *et al.*, *Int. J. Biol. Macromol.*, 2024, **259**(1), 129186]. Nonostante gli idrotropi acidi rappresentino dei sistemi più che promettenti nei processi di delignificazione, numerosi aspetti sono ancora da approfondire e perfezionare al fine di promuovere il loro sviluppo a livello industriale, inclusi il recupero e la riciclabilità del solvente idrotropo. Inoltre, ad oggi è necessario utilizzare concentrazioni elevate di idrotropo, a causa della sua limitata penetrabilità, che

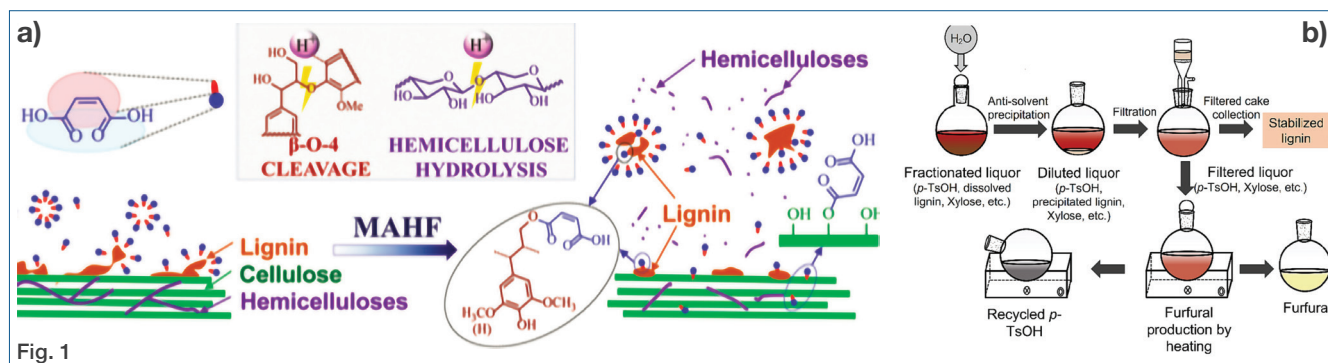


Fig. 1



a loro volta richiedono opportune apparecchiature in grado di resistere a soluzioni fortemente acide.

Un chatbot chimico come assistente

L'intelligenza artificiale (AI) è uno strumento utile nella progettazione della sintesi di nuovi materiali perché capace di estrarre le informazioni utili da enormi quantità di dati, spesso difficili da identificare ed estrarre. Secondo Yaghi *et al.* [O.M. Yaghi *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, **145**, DOI: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.3c05819>], nei prossimi ChatGPT verrà utilizzato come vero e proprio assistente 'chimico' (ChatGPT Chemistry Assistant, CCA) nella pratica quotidiana del laboratorio dove, attualmente, l'implementazione l'uso di AI richiede ancora molto l'intervento informatico. Gli autori presentano una guida, denominata *ChemPrompt Engineering*, sull'ingegneria dei prompt di ChatGPT dedicata al contesto chimico. L'obiettivo principale è rendere questa tecnologia di *text mining* automatico accessibile ai ricercatori, indipendentemente dalla loro conoscenza dell'intelligenza artificiale, colmando il divario tra esperti chimici e informatici. Il *chatbot* sviluppato da Yaghi è stato applicato con successo alla sintesi di MOFs, ma la sua versatilità lo rende potenzialmente adattabile a diverse aree di ricerca scientifica. Per garantire che il *text mining* produca dati affidabili e precisi, gli autori hanno selezionato un dataset di articoli ben ponderato, dando priorità ad articoli di alta qualità e ben citati, anziché incorporare indiscriminatamente tutti gli articoli. Ogni articolo passa attraverso una fase di filtraggio, classificazione e riassunto, con l'obiettivo finale di ottenere le condizioni della sintesi dei MOFs organizzate in tabelle. Il processo di analisi inizia con la suddivisione di ogni articolo in sezioni sperimentali e non sperimentali attra-

verso l'utilizzo di metodi di *text embeddings*. Questi metodi, basati su una rappresentazione vettoriale del testo, catturano le informazioni semantiche, permettendo la quantificazione delle relazioni tra i contenuti. Le sezioni sperimentali vengono successivamente esaminate dal CCA per identificare esclusivamente i paragrafi contenenti informazioni sulla sintesi dei MOFs. ChatGPT è stato 'allenato' per riconoscere questi paragrafi ed etichettarli. Nella fase finale CCA analizza i paragrafi contenenti le informazioni sintetiche, estrae i parametri richiesti e li organizza in tabelle secondo le indicazioni dettate dal *prompt* (Fig. 2). La scelta di riassumere le condizioni di sintesi in una tabella è dettata dalla volontà di semplificare la classificazione, l'analisi e l'archiviazione dei dati. I dati tabulati possono essere impiegati come 'descrittori' per costruire modelli predittivi per gli esiti delle reazioni o creare un chatbot interattivo su argomenti specifici.

ChatGPT genera i *prompts* dei vari passaggi in modo automatico, i ricercatori inseriscono i requisiti per ciascun modello usando il linguaggio naturale (LLM) specificando gli input e gli output desiderati, e ChatGPT genera il codice Python appropriato per tutto il processo.

I *ChemPrompt Engineering* sono una parte essenziale del processo perché guidano ChatGPT verso la generazione di informazioni più precise e pertinenti, evitando il più possibile le allucinazioni.

Il processo di analisi inizia con la suddivisione di ogni articolo in sezioni sperimentali e non sperimentali attra-

