

Università degli Studi di Salerno – Dip. Chimica e Biologia

Tesi di dottorato in Chimica (XII Ciclo – A.A. 2012/2013): Transport properties of drug precursor molecules in nanoporous polymers.

Candidata: Marianna Loria

Tutor: Prof. Vincenzo Venditto

Coordinatore: Prof. Gaetano Guerra

### Abstract (english)

This PhD thesis is framed in the European project CUSTOM, which aims to develop a small size device able to detect drug precursors molecules in the air, even when they are just in traces. The project is part of the European strategies to fight the illegal drug trafficking, that is a serious problem experienced in all countries worldwide. Recently, in fact, drug traffickers smuggle drug precursor molecules, that is molecules that are converted into the final product through chemical processes, once arrived in the country of destination. For this reason many efforts are making to detect the presence of precursors in very low concentrations using dedicated sensors. The low concentration of these kind of molecules requires that the sampling techniques concentrate as much as possible the target analytes. For this purpose, syndiotactic polystyrene (sPS), a cheap and commercial thermoplastic polymer, can be a good choice: it can be achieved in highly porous crystalline morphologies (aerogels) able to maximize molecules sorption and desorption kinetics thanks to their high surface area<sup>1</sup>. High-porosity sPS aerogels can be obtained by supercritical CO<sub>2</sub> extraction of the solvent present in sPS physical gels (gels in which the junctions between polymer chains consist of crystalline regions). Furthermore, sPS crystalline aerogels can be achieved in two different nanoporous crystal forms, delta ( $\delta$ ) and epsilon ( $\epsilon$ ). These two phases present well-defined empty spaces distribute into the crystal lattice as cavities ( $\delta$  form) or channels ( $\epsilon$  form). Both these two crystalline forms are able to rapidly absorb volatile organic compounds (VOCs), mainly halogenated or aromatic hydrocarbons, from water and air also when present at very low concentrations<sup>2</sup>. This polymer, combined with a suitable detection system for these precursor molecules, could be a winning choice for the purposes of the CUSTOM project.

Within the project, our tasks and objectives are to evaluate the capacity and the effectiveness of the polymer to absorb some target drug precursors, to validate the air sampling module which will be implemented in the device and, finally, to establish if and how the presence of some common pollutants in the air could affect the sorption of the selected precursors.

## Abstract (italiano)

Questa tesi di dottorato è inquadrata nel progetto Europeo CUSTOM, che ha lo scopo di sviluppare un dispositivo portatile capace di rilevare i precursori di droghe nell'aria, anche quando questi sono presenti in tracce. Il progetto è parte delle strategie dell'Unione Europea per combattere il traffico illegale di sostanze stupefacenti, che è un serio problema sentito in tutto il mondo. Recentemente, infatti, i trafficanti di droga contrabbandano precursori di droghe, cioè molecole che sono convertite nel prodotto finale attraverso processi chimici, una volta arrivate nel paese di destinazione. Per questo motivo molti sforzi sono stati fatti per rilevare la presenza di precursori in concentrazioni molto basse usando appositi sensori. La bassa concentrazione di questo tipo di molecole richiede che le tecniche di campionamento concentrino quanto più possibile gli analiti. A questo scopo, il polistirene sindiotattico (sPS), un polimero termoplastico commerciale ed economico, può essere una buona scelta: esso può essere ottenuto in morfologie cristalline altamente porose (aerogeli) capaci di massimizzare le cinetiche di assorbimento e desorbimento delle molecole grazie alla loro elevata area superficiale. Gli aerogeli di sPS ad alta porosità possono essere ottenuti per estrazione con CO<sub>2</sub> supercritica del solvente presente nei geli fisici di sPS (geli in cui le giunzioni tra le catene di polimero consistono in regioni cristalline). Inoltre, gli aerogeli cristallini di sPS si possono ottenere in diverse forme cristalline nanoporose, delta ( $\delta$ ) ed epsilon ( $\epsilon$ ). Queste due fasi presentano spazi vuoti ben definiti distribuiti nel reticolo cristallino come cavità (forma  $\delta$ ) o canali (forma  $\epsilon$ ). Entrambe queste forme cristalline sono capaci di assorbire rapidamente composti organici volatili, principalmente idrocarburi alogenati o aromatici, dall'acqua e dall'aria anche quando sono presenti in bassissime concentrazioni. Questo polimero, combinato con un opportuno sistema di rilevazione per i precursori di droghe, potrebbe rivelarsi la scelta vincente per gli scopi del progetto CUSTOM.

All'interno del progetto, i nostri compiti ed obiettivi sono quelli di valutare la capacità e l'efficacia del polimero di assorbire alcuni precursori di droga selezionati, validare il modulo di campionamento dell'aria che sarà implementato nel dispositivo e, infine, di stabilire se e come la presenza di alcuni comuni inquinanti dell'aria possono inficiare l'assorbimento dei precursori selezionati.