



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TORINO

Titoli dei progetti di ricerca
Dottorato di Ricerca in SCIENZE CHIMICHE E DEI MATERIALI

Research Topics
PhD Programme in CHEMICAL AND MATERIAL SCIENCES

TEMATICHE INNOVAZIONE

Referente scientifico/tutor	Titolo del progetto/Project title - Requisiti	Descrizione sintetica / Short description
Marabello Domenica	Materiali cristallini a base di porfirinati metallici con proprietà di ottica non lineare per lo sviluppo di sensori e materiali smart per l'optoelettronica / <i>Crystalline materials based on metal-porphyrinates with non-linear</i>	Il progetto intende rispondere alla domanda di materiali innovativi eco-friendly e smart, che presentano proprietà di ottica non lineare (NLO) adatti alla microscopia SHG e/o proprietà meccaniche utili ad applicazioni optoelettroniche. Il progetto si propone quindi di sintetizzare e caratterizzare materiali con le proprietà indicate utilizzando un approccio multidisciplinare di Crystal Engineering, che combina metodologie sperimentali con strumenti della Chimica Computazionale. Questo approccio consente di determinare la correlazione tra le caratteristiche del materiale e le sue proprietà ottiche e fisiche e,

optic properties to develop sensors and smart materials for application in optoelectronics.

attraverso un processo iterativo e sinergico di confronto di dati sperimentali e risultati di calcoli teorici, di identificare quali siano le caratteristiche che il materiale deve possedere per avere le proprietà desiderate. I materiali da sviluppare saranno a base di porfirinati metallici solidi, da applicare nella sensoristica e nell'optoelettronica. Ci si aspetta di individuare, tramite l'approccio sperimentale-teorico, i porfirinati metallici che possiedano le proprietà ottiche SHG più promettenti e la migliore risposta meccanica all'illuminazione laser. Ci si aspetta altresì di correlare la natura intrinseca di tali materiali con le proprietà esterne, al fine di comprenderne il meccanismo di funzionamento, che permetterà di guidare la sintesi verso materiali con prestazioni superiori.

L'attività di dottorato verrà svolta presso i Dipartimenti di Chimica dell'Università di Torino e di Milano, la ditta 2Dto3D e l'INRIM di Torino.

Il/la dottorand* dovrà possedere una buona conoscenza della lingua inglese e avere competenze nella sintesi, caratterizzazione e cristallizzazione di porfirine e porfirinati, nella chimica computazionale (in particolare nell'uso dei softwares Gaussian16 e Crystal17) e nella caratterizzazione dei materiali tramite diffrazione dei raggi X da cristallo singolo e da polveri cristalline, spettroscopie UV-VIS, EPR, IR e misure di SHG.

The project intends to respond to the request for innovative eco-friendly and smart materials, with Non Linear Optic (NLO) properties for SHG microscopy and/or with mechanical properties for optoelectronic applications. Thus, the project aims to synthesize and characterize materials with these properties, using a multidisciplinary approach of Crystal Engineering that combines the experimental methodologies with the instruments of Computational Chemistry. This approach allows one to determine the correlation between the features of the material and its optical and physical properties and, through an interactive and synergic process of comparison between experimental data and theoretical calculation, to identify the features that the material should possess to show the wanted properties. The materials to develop are based on solid metal-porphyrinates to apply in sensor production and optoelectronics. Through the experimental-theoretical approach, we expect to select the metal-porphyrinates with the best SHG properties and the best response to the mechanical solicitation to the laser irradiation. Furthermore, we expect to relate the intrinsic nature of these materials to the showed properties, to understand the operating

		<p><i>mechanism that will permits to drive the synthesis towards materials with superior performances.</i></p> <p><i>The PhD activity will be executed at the Departments of Chemistry of Torino and Milano Universities, the 2Dto3D Company and the INRIM of Torino.</i></p> <p><i>The PhD student must have a good knowledge of English language and must have skills on the synthesis, characterization and crystallization of porphyrins and metal-porphyrinates, on the computational chemistry (special on the use of Gaussian16 and Crystal17 softwares) and on the characterization of the materials with single crystal and powder X-ray diffraction, UV-VIS, EPR, IR spectroscopies and on SHG measurements.</i></p>
<p>Vincenti Marco</p>	<p>DOLPHINS: Un modello a basso costo di manutenzione predittiva in tempo reale per il settore automotive / <i>DOLPHINS: A low-cost real-time predictive maintenance model for the automotive framework</i></p>	<p>Il tema dell'Industry 4.0 è divenuto uno degli ambiti di ricerca e sviluppo su cui le imprese hanno iniziato ad investire in modo sempre più robusto, dando luogo ad una vera e propria trasformazione economica e tecnologica in Italia e nel mondo. Di conseguenza, le aziende stanno orientando la propria attività di ricerca e sviluppo verso la messa in opera di sistemi produttivi monitorabili in tempo reale (real-time) in termini di manutenzione predittiva. Quest'ultima rappresenta, inoltre, un utile strumento di prevenzione per la riduzione dei rischi in impianto, volto ad un miglioramento delle condizioni di sicurezza degli operatori sul lavoro.</p> <p>L'attività principale del/della dottorand* sarà quella di costruire dei modelli statistici per ottimizzare il processo produttivo in termini di manutenzione predittiva, al fine di evitare fermi macchina grazie all'introduzione in impianto di un sistema di prevenzione e manutenzione efficace, guidato da tecniche di Machine Learning. Tale processo prevederà il raggiungimento di una condizione nota come "near zero-stop machine", ovvero sia di un impianto con strumentazioni che possano lavorare in continuo e senza il verificarsi di fermi o guasti non previsti. Tramite questo approccio, il/la dottorand* avrà l'obiettivo di adattare la linea di produzione ad un incombente guasto, senza effettuare investimenti in termini di sensing, e sfruttando le tecniche di Machine Learning per l'elaborazione di dati già disponibili. Il/la dottorand* dovrà inoltre costruire strumenti predittivi in grado di fornire</p>

ai manutentori le informazioni adatte ad effettuare un intervento di manutenzione, in un tempo compreso tra (almeno) 30 minuti e 3 ore prima del verificarsi di un guasto.

Il/la dottorand* selezionat* per il progetto, oltre ad una buona conoscenza della lingua inglese, deve possedere/sviluppare competenze in ambito di linguaggi di programmazione quali Python, R, HTML e, possibilmente, SQL e JavaScript.

Industry 4.0 has become one of the areas of research and development in which companies have begun to invest in an increasingly robust way, giving rise to a fundamental economic and technological transformation in Italy and worldwide. Consequently, companies are orienting their research and development activities towards implementing production systems that can be monitored in real-time in terms of predictive maintenance. The latter also represents a valuable prevention tool for reducing risks in the plant, aimed at improving the safety conditions of operators at work.

The main activity of the PhD candidate will be to build statistical models to optimize the production process in terms of predictive maintenance to avoid machine downtime thanks to the introduction of an effective prevention and maintenance system in the plant, guided by Machine Learning techniques. This process will achieve a condition known as a “near zero-stop machine”, i.e. a plant with machinery that can work continuously and without unexpected stops or failures. Through this approach, the PhD candidate will adapt the production line to an impending failure without making investments in terms of sensing and using Machine Learning techniques for processing already available data. Furthermore, the PhD candidate will also have to build predictive tools capable of providing maintenance technicians with the information suitable for carrying out a maintenance intervention in a time between (at least) 30 minutes and 3 hours before the occurrence of a fault.

The PhD candidate selected for the project must possess/develop skills in programming languages such as Python, R, HTML, and, possibly, SQL and JavaScript, in addition to a good knowledge of English.

TEMATICHE GREEN

Referente scientifico/tutor	Titolo del progetto/Project title - Requisiti	Descrizione sintetica / Short description
Alberto Castellerò	Leghe di alluminio secondarie e processi metallurgici innovativi per applicazioni automotive sostenibili / <i>Secondary aluminium alloys and innovative metallurgical processes for sustainable automotive applications</i>	<p>Componenti automotive leggeri di forma complessa sono prevalentemente realizzati con leghe alluminio-silicio (Al-Si) mediante pressocolata in stampo (High Pressure Die Casting, HPDC). Processi (p.e. RheoMetal) in cui la pressocolata è realizzata con una miscela liquido/solido anziché la lega fusa consentono di evitare la solidificazione dendritica di Al, l'intrappolamento del liquido residuo e la formazione di porosità. Nei processi di fonderia sopradescritti, è di estremo interesse l'uso di leghe secondarie, ovvero riciclate, con ridotto impatto energetico rispetto all'uso di Al estratto dal minerale.</p> <p>Obiettivi del progetto, in collaborazione con l'azienda 2a S.p.a., sono:</p> <ol style="list-style-type: none">1) Eliminazione del trattamento termico post-HPDC, mediante l'aggiunta di modificatori dell'eutettico Al-Si ed inoculanti per evitare la formazione di dendriti grossolane di Al.2) Ampliamento della regione bifasica liquido/solido mediante micromodifiche composizionali, al fine di impiegare leghe ad alto contenuto di Si nel processo RheoMetal.3) Validazione delle proprietà dei manufatti prodotti mediante leghe secondarie. <p>Risultati attesi</p> <p>Obiettivo 1:</p> <ul style="list-style-type: none">- Correlazione tra le modifiche in lega e proprietà strutturali, microstrutturali e meccaniche dei manufatti pressocolati.

- Produzione di manufatti con costi ed impatto energetico ridotti a parità di prestazioni.

Obiettivo 2:

- Validazione sperimentale della stabilità della regione bifasica liquido/solido calcolata mediante Calphad.
- Correlazione tra i parametri del processo RheoMetal e proprietà meccaniche, strutturali e microstrutturali dei manufatti.

Obiettivo 3:

- manifattura di componenti automotive con leghe secondarie micromodificate senza perdita nelle prestazioni.

Competenze dottorando/dottoranda

Conoscenze di metallurgia e scienza dei materiali, delle principali tecniche di indagine strumentale quali diffrazione di raggi X, microscopia ottica ed elettronica ed analisi termica, prove meccaniche.

Light automotive components are mainly realized with aluminium-silicon (Al-Si) alloys by High Pressure Die Casting (HPDC). Processes (e.g. RheoMetal) where a solid/liquid mixture is used, instead of the molten alloy, allow to avoid the dendritic solidification of Al and formation of porosity due to shrinkage of residual entrapped liquid. Additionally, in foundry processes the use of secondary alloys (i.e. recycled) attracts great interest due to the reduced energetic impact with respect to Al directly extracted from the mineral.

Objectives of the project, in collaboration with the company "2a S.p.a." are:

- 1) Elimination of thermal treatment after HPDC through addition of modifiers (Al-Si eutectic) and grain refiners to avoid the formation of coarse Al dendrites.*
- 2) Enlargement of the liquid/solid region in Si-rich alloys (9%) through small compositional changes, assessed by Calphad method, to be used in RheoMetal process*

		<p>3) <i>Validation of mechanical properties of components produced with secondary alloys.</i></p> <p><i>Expected results</i></p> <p><i>Objective 1:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>Correlation between modification of the alloy composition and structural, microstructural and mechanical properties of die-cast components.</i> - <i>Production of components with reduced cost and energetic impact, without lowering mechanical properties.</i> <p><i>Objective 2:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>Experimental validation of the stability of liquid/solid region calculated by Calphad.</i> - <i>Correlation between parameters of the RheoMetal process and mechanical, structural and microstructural properties of components.</i> <p><i>Objective 3:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>manufacturing of automotive components with modified secondary alloys without lowering mechanical properties.</i> <p><i>_Competences requirements</i></p> <p><i>Knowledge of metallurgy and materials science, main instrumental techniques such as X-ray diffraction, optical and electron microscopies, thermal analysis and mechanical testing.</i></p>
Valentina Brunella	Sviluppo di materiali per applicazioni automobilistiche da fonti biologiche / <i>Development of materials for automotive applications from biological sources</i>	Il progetto è focalizzato sullo sviluppo di materiali plastici da fonti biologiche o da riciclo chimico per applicazioni automobilistiche. Il settore automobilistico richiede materiali con elevate proprietà fisiche, chimiche e meccaniche al fine di garantire il mantenimento della funzionalità del veicolo per tutta la sua vita su strada ed un limitato degrado delle caratteristiche estetiche. Agli elevati standard qualitativi richiesti va associata la necessità del settore sia per le legislazioni vigenti sia per la richiesta del mercato, di aumentare il contenuto di materiali sostenibili. Nello sviluppo e selezione dei materiali da fonti

biologiche e/o da riciclo chimico è fondamentale valutarne l'applicabilità per componenti vettura. A tal fine diventa fondamentale poter effettuare delle simulazioni virtuale tramite modelli CAE, ricavando tramite le tecniche più aggiornate, come la Digital Image Correlation, i migliori dati sui materiali. A tal fine saranno necessarie misure dirette del comportamento a trazione di provini, in diverse condizioni ambientali e a diverse velocità di impatto ed analisi accurate delle curve sforzo-deformazione.

Durante il primo anno verranno effettuati alcuni test su plastiche automobilistiche da fonti fossili in confronto con materiali da fonti biologiche e/o da riciclo chimico. Nel secondo anno l'obiettivo sarà sviluppare nuovi materiali da fonti biologiche e/o da riciclo chimico al fine di colmare i limiti emersi nella prima fase di raccolta dati. Infine, nel terzo anno l'attività comporterà il completamento dello sviluppo e la selezione dei materiali che avranno raggiunto i requisiti necessari all'applicazione su veicolo. I risultati attesi sono: lo sviluppo di materiali sostenibili da fonti biologiche e/o da riciclo chimico e la validazione anche per i materiali sostenibili dei protocolli di test per la raccolta di dati per l'analisi virtuale.

Il/la dottorand* deve possedere conoscenze nel campo dei materiali polimerici.

The project is focused on the development of plastic materials from biological sources or chemical recycling for automotive applications. The automotive sector requires materials with high physical, chemical and mechanical properties to ensure the maintenance of the functionality of the vehicle throughout its life on the road and a limited degradation of aesthetic characteristics. The high quality standards required are combined with the need of the sector, both for current legislation and for market demand, to increase the content of sustainable materials. In the development and selection of materials from biological sources and/or from chemical recycling it is fundamental to evaluate their applicability for car components. It becomes essential to be able to perform virtual simulations using CAE models, obtaining through the most up-to-date techniques, such as Digital Image Correlation, the best data on materials. Direct measurements of the tensile behavior of specimens, in different environmental conditions and at different impact velocities and accurate analysis of stress-strain curves will be required.

During the first year some tests will be performed on plastics from fossil sources in comparison with materials from biological sources and/or chemical recycling. In the second

		<p><i>year the objective will be to develop new materials from biological sources and/or from chemical recycling in order to overcome the limitations that emerged in the first phase of data collection. In the third year the activity will involve the completion of the development and selection of materials that will have achieved the necessary requirements for application on vehicles. The expected results are: the development of sustainable materials from biological sources and/or from chemical recycling and the validation also for sustainable materials of the test protocols for the collection of data for virtual analysis. The Ph.D student must have knowledge in the field of polymeric materials.</i></p>
Federico Picollo	<p>Sviluppo di dispositivi microfluidici per l'analisi di contaminanti ambientali / <i>Development of microfluidic devices for environmental contaminants analysis</i></p>	<p>Una delle risorse naturali più preziose, il cui impatto è trasversale su più livelli della società, è l'acqua, pertanto garantire una gestione sostenibile delle risorse idriche lungo l'intero ciclo, risulta essere imprescindibile da un controllo capillare della presenza di inquinanti. Un caso specifico è il monitoraggio dell'inquinamento dell'acqua da metalli pesanti in quanto questi risultano essere estremamente tossici per gli organismi viventi anche a bassissime concentrazioni. Gli attuali metodi di laboratorio utilizzati per l'analisi dei metalli pesanti nell'acqua richiedono strumentazione sofisticata e tecnici altamente qualificati, che li rendono inadatti a routine di monitoraggio ambientale.</p> <p>In tale contesto si colloca il progetto di dottorato, avendo come obiettivo quello di sviluppare sensori microfluidici che consentiranno analisi con elevata sensibilità su picolitri di analita per innumerevoli cicli di misura.</p> <p>L'attività di ricerca verrà focalizzata allo sviluppo del circuito microfluidico ed all'ottimizzazione degli elettrodi nanostrutturati in diamante/grafite per garantire elevata riproducibilità e sensibilità di rivelazione. Al fine di realizzare con estrema flessibilità dispositivi aventi varie geometrie dei microcanali verrà impiegata la stampa 3D stereolitografica, mentre il diamante artificiale micro/nano-funzionalizzato con strutture grafite verrà impiegato o come elettrodo di lavoro per misure elettrochimiche o come punto di aggancio per processi di funzionalizzazione chimica. Lo studente trascorrerà 6 mesi di distacco presso l'azienda FLUODY s.r.l. basata in Italia. In questo periodo acquisirà competenze nella sintesi di molecole altamente fluorescenti oltre che allo sviluppo di processi utili alla funzionalizzazione selettiva della grafite.</p>

		<p>Il candidato deve avere competenze di base nella fisica dello stato solido, essenziali nelle fasi fabbricative dei sensori, e nella chimica organica per comprendere i processi di funzionalizzazione.</p> <p>Conoscenza della lingua italiana o inglese</p> <p><i>One of the most precious natural resources, whose impact is transversal on multiple levels of society, is the water, therefore a capillary control of the presence of pollutants is essential ensuring sustainable management of water resources throughout the entire cycle.</i></p> <p><i>A specific case is the monitoring of water pollution by heavy metals as these are extremely toxic to living organisms even at very low concentrations. Current laboratory methods used for analyzing heavy metals in water require sophisticated instrumentation and highly skilled technicians, making them unsuitable for routine environmental monitoring.</i></p> <p><i>The PhD project is placed in this context, with the aim of developing microfluidic sensors that will allow analyzes with high sensitivity on picoliters of analyte for numerous measurement cycles.</i></p> <p><i>The research activity will be focused on the development of the microfluidic circuit and the optimization of the nanostructured diamond/graphite electrodes to ensure high reproducibility and detection sensitivity. In order to create devices with various microchannel geometries with extreme flexibility, stereolithographic 3D printing will be used, while the artificial diamond with micro/nano-functionalized graphitic structures will be used either as a working electrode for electrochemical measurements or as a coupling point for processes of chemical functionalization. The student will spend 6 months on secondment at FLUODY s.r.l. based in Italy. In this period, he/she will acquire skills in the synthesis of highly fluorescent molecules as well as in the development of processes useful for the selective functionalization of graphite.</i></p> <p><i>The candidate must have basic skills in solid-state physics, essential in the manufacturing phases of sensors, and in organic chemistry to understand functionalization processes.</i></p>
Federica Dal Bello	Identificazione di nuove strategie terapeutiche per malattie oncologiche causate	L'adenocarcinoma polmonare è una delle principali cause di morte per neoplasia al mondo. Fra i principali fattori di rischio possiamo individuare l'inquinamento atmosferico. Negli ultimi decenni si è osservato un aumento dei livelli di inquinanti atmosferici che potrebbe

dall'inquinamento atmosferico /
*Identification of new therapeutic
strategies for oncological diseases
caused by air pollution*

portare, nei prossimi anni ad un aumento nell'incidenza di adenocarcinoma polmonare. Il presente progetto di dottorato prevede lo studio dell'impatto di agenti inquinanti grazie alla messa a punto e applicazione di metodiche analitiche sul tumore polmonare con l'obiettivo di comprendere le dinamiche coinvolte nello sviluppo del tumore e i meccanismi di resistenza alle terapie farmacologiche così da poterlo contrastare efficacemente.

Il nostro obiettivo è la valutazione dell'impatto di POPs (Persistent Organic Pollutants) sui meccanismi molecolari che regolano lo sviluppo dell'adenocarcinoma polmonare ed in particolare il sottotipo caratterizzato da mutazioni nell'oncogene KRAS. Ipotizziamo che i POPs influiscano sulla trascrizione di proteine scaffold e adattatori coinvolti nell'assemblaggio e nel funzionamento del signalosoma KRAS, in particolare ciclofilina A (CYPA). Lo studio del ruolo della ciclofilina A in NSCLC e lo studio del suo legame con KRAS potrebbe fornire nuove informazioni e aprire la strada a nuove terapie target. Attraverso lo studio del coinvolgimento di CYPA nella pathway di KRAS ci si aspetta di acquisire nuove conoscenze sulle meccaniche che regolano questa via di trasduzione del segnale coinvolta nei meccanismi di proliferazione e sviluppo cellulare. Chiariti tali meccanismi verrà studiata l'eventuale azione dei POPs stessi nell'influenzare la formazione del complesso funzionale KRAS responsabile dell'insorgenza della patologia.

E' richiesta al/alla dottorand*:

- capacità comprovata da esperienza pratica in tecniche di biologia molecolare
- conoscenza della lingua inglese

Lung adenocarcinoma is one of the leading causes of cancer death in the world. Among the main risk factors, we can identify air pollution. Recently, an increase in the levels of atmospheric pollutants has been observed which could lead, in the coming years, to an increase in the incidence of lung adenocarcinoma. This PhD project focuses on the study of the impact of pollutants on lung cancer thanks to the development and application of analytical methods with the aim of understanding the dynamics involved in tumor development and the mechanisms of resistance to drug therapies.

Our goal is to evaluate the impact of POPs (Persistent Organic Pollutants) on the molecular mechanisms that regulate the development of lung adenocarcinoma and in particular the subtype characterized by mutations in the KRAS oncogene. We hypothesize that POPs affect

		<p><i>the transcription of scaffold proteins and adapters involved in the assembly and functioning of the KRAS signalosome, in particular cyclophilin A (CYPA). The study of the role of cyclophilin A in NSCLC and the study of its link with KRAS could provide new information and pave the way for new targeted therapies. Through the study of the involvement of CYPA in the KRAS pathway it is expected to acquire new knowledge on the mechanisms that regulate this signal transduction pathway involved in oncogenic cell proliferation. Once these mechanisms have been clarified, the possible action of the POPs themselves in influencing the formation of the KRAS functional complex responsible for the onset of the disease will be studied.</i></p> <p><i>Skills of the doctoral candidate:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>proven expertise in molecular biology techniques</i> - <i>fluent English, spoken and written</i>
<p>Claudio Medana</p>	<p>ANALISI DI INQUINANTI MICROPLASTICI IN ACQUE MINERALI / <i>ANALYSIS OF MICROPLASTIC POLLUTANTS IN MINERAL WATERS</i></p>	<p>La presente proposta ha come scopo la valutazione della presenza e dell'impatto delle microplastiche (MP), sull'ecosistema acquifero. Si intendono validare e applicare metodi analitici specifici per qualificare e quantificare i polimeri microplastici e i componenti chimici che li accompagnano o che da essi derivano, nelle acque minerali.</p> <p>Il progetto di ricerca si pone lo scopo di recensire, validare e applicare a campioni reali diversi metodi analitici per il monitoraggio e il controllo della presenza di microplastiche e prodotti chimici correlati in campioni di acqua minerale di sorgente e imbottigliata del territorio nazionale, anche a confronto con campioni di provenienza internazionale.</p> <p>Primo auspicio della proposta progettuale è la messa a punto da parte della/del dottoranda/o di una metodica analitica validata e certificabile per effettuare la determinazione quali-quantitativa di microplastiche, in linea con lo stato dell'arte scientifico e con le linee guida dei potenziali enti di controllo preposti al monitoraggio e alla prevenzione della contaminazione del suolo e delle acque. Oltre alla definizione delle metodiche analitiche di riferimento per effettuare il monitoraggio, il controllo chimico-fisico dovrà essere applicato a un congruo numero di campioni di acque minerali provenienti da sorgenti di differente tipologia. I dati ottenuti (necessariamente anonimizzati) verranno trattati statisticamente ed elaborati con tecniche di analisi multivariata anche allo scopo di effettuare valutazioni di rischio tossicologico. I risultati della ricerca dovranno essere opportunamente pubblicati e disseminati.</p>

		<p>E' richiesta al/alla dottorand*: conoscenza approfondita delle tecniche di spettrometria di massa interfacciata con la cromatografia. Buona conoscenza della lingua inglese</p> <p><i>This proposal aims to assess the presence and impact of microplastics (MP) on the water ecosystem. We intend to validate and apply specific analytical methods to qualify and quantify microplastic polymers and the chemical components that accompany them or derive from them, in mineral waters.</i></p> <p><i>The research project aims to review, validate and apply different analytical methods for monitoring and controlling the presence of microplastics and related chemical products to real samples of spring and bottled mineral water of the national territory, also in comparison with samples of international origin.</i></p> <p><i>The first hope of the project proposal is the development by the PhD student of a validated and certifiable analytical method to carry out the qualitative and quantitative determination of microplastics, in line with the scientific state of the art and with the guidelines of the potential control agencies responsible for monitoring and preventing soil and water contamination. In addition to the definition of the reference analytical methods for carrying out MP monitoring, the chemical-physical control must be applied to an adequate number of mineral water samples from sources of different types. The data obtained (necessarily anonymized) will be statistically treated and processed with multivariate analysis techniques also for the purpose of carrying out toxicological risk assessment. The results of the research must be properly published and disseminated.</i></p> <p><i>Skills of the doctoral candidate: In-depth knowledge of mass spectrometry techniques interfaced with chromatography. Good knowledge of the English language.</i></p>
Vittorio Pace	<p>Tattiche Sostenibili di Omologazione non Basate sull'Uso di Diazometano / <i>Sustainable C1-Homologation Tactics not Relying on Diazomethane</i></p>	<p>Le operazioni di omologazione in sintesi organica consistono nel rilascio formale di un atomo di carbonio - normalmente in forma di metilene (CH₂) - a livello di un legame preformato tipo C-X, con conseguente formazione di un'entità C-CH₂-X. Prototipo di agente omologante è la specie gassosa - altamente tossica - diazometano il cui uso, tuttavia, pone severe limitazioni in termini di sostenibilità essendo esso un reagente esplosivo e, come tale di assai difficile controllo tanto in ambiente accademico quanto industriale. Ciononostante, esso risulta praticamente insostituibile in sintesi farmaceutica con particolare riferimento alla preparazione di agenti antivirali (es. Nelfinavir). In linea con le tematiche di ricerca sviluppate dal PI del progetto, l'impiego di reagenti quali i carbenoidi</p>

metallici (M-CH₂-X) ottempera alle esigenze della sintesi moderna ed eco-sostenibile, specie quando associata dall'impiego di solventi ad alto impatto ambientale derivati da biomasse.

Considerando la novità concettuale dell'impiego di carbenoidi in termini di implementazione sostenibile delle reazioni di omologazione, ci si prefigge di realizzare in mezzi non convenzionali reazioni di formazione di sistemi ciclici eteroatomici. Studi di docking molecolare su proteasi virali (HIV) hanno individuato il nucleo del 2-iminotietano quale farmacoforo in grado d'impartire attività biologica. L'analisi retrosintetica permette di individuare gli eterocumuleni come substrati per l'ottenimento del ciclo a quattro termini mediante una sequenza di due omologazioni. Evidentemente l'impiego di carbenoidi non solo evita una strategia sintetica basata sul diazometano, ma introduce anche il concetto - sinora ignoto - di omologazione successiva. Tre aspetti sono rilevanti: 1) progettazione di nuovi profili di reattività chimica; 2) impiego nella preparazione di derivati farmaceutici la cui struttura ad oggi è ignota e, 3) eliminazione di reagenti chimici e solventi il cui utilizzo è non più tollerabile per via delle limitazioni che, come tali, li pongono in aperto contrasto coi cosiddetti 12 Principi della Green Chemistry enunciati da P. Anastas.

Competenze del candidato: Esperienza in sintesi organica ed ottima conoscenza dell'Inglese.

Homologations in organic synthesis consist in the formal release of a carbon atom - normally in the form of methylene (CH₂) - at the level of a preformed C-X type bond, with consequent formation of a C-CH₂-X entity. Prototype of homologating agent is the gaseous - highly toxic - diazomethane whose use, however, poses severe limitations in terms of sustainability as it is an explosive reagent and, as such, very difficult to control both in an academic and industrial environment. Nevertheless, it is practically irreplaceable in pharmaceutical synthesis with particular reference to the preparation of antiviral agents (eg Nelfinavir). In line with the research themes developed by the PI of the project, the use of reagents such as metal carbenoids (M-CH₂-X) complies with the needs of modern and eco-sustainable synthesis, especially when associated with the use of solvents with high environmental impact derived from biomass.

		<p><i>Considering the conceptual novelty of the use of carbenoids in terms of sustainable implementation of homologation reactions, the aim of the project is to carry out in unconventional solvents reactions for forming heteroatomic cyclic systems. Molecular docking studies on viral proteases (HIV) have identified the nucleus of 2-iminothethane as a pharmacophore capable of imparting biological activity. Retrosynthetic analysis allows to identify heterocumulenes as substrates for obtaining the four-term cycle by means of a sequence of two homologations. Evidently, the use of carbenoids not only avoids a synthetic strategy based on diazomethane, but also introduces the concept - hitherto unknown - of consecutive homologations. Three aspects are relevant: 1) design of new chemical reactivity profiles; 2) use in the preparation of pharmaceutical derivatives whose structure is unknown to date and, 3) elimination of chemical reagents and solvents whose use is no longer tolerable due to the limitations which place them in sharp contrast with the so-called 12 Principles of Green Chemistry enunciated by P. Anastas.</i></p> <p><i>Skills of the doctoral candidate: Experience in organic synthesis and excellent knowledge of English.</i></p>
Valter Maurino	<p>Materiali di attrito Ecosostenibili per la mobilità elettrica e ibrida: miglioramento delle proprietà tribologiche e della sostenibilità guidato da Life Cycle Analysis / <i>Eco-sustainable friction materials for electric mobility: improvement of tribological properties and sustainability guided by Life Cycle Analysis</i></p>	<p>L'industria automobilistica sta affrontando enormi sfide per ciò che riguarda la sostenibilità, con la necessità di diminuire le emissioni, la deplezione di risorse, i consumi energetici e l'impatto sugli ecosistemi in tutto il ciclo di vita del prodotto. Il settore dei trasporti è responsabile di circa il 55% delle emissioni di particolato fine (PM2.5) a livello globale, delle quali il 21% attualmente deriva da particolato d'usura (pneumatici, freni). Lo scopo di questo progetto è lo sviluppo di compositi per freni frizionali a basso impatto ambientale. Il primo obiettivo sarà il miglioramento della eco-sostenibilità delle pastiglie freno durante tutto il ciclo di vita. Lo studio sarà eseguito allo scopo di diminuire la deplezione di risorse non rinnovabili ed introdurre materiali ecosostenibili e rinnovabili (e.g. sostituzione di resine fenoliche con resine biobased o leganti geopolimerici). Il miglioramento della sostenibilità verrà perseguito tramite studi dettagliati di Life Cycle Analysis e di scelta di (nano)materiali alternativi a basso impatto ambientale a partire dalle proprietà tribologiche richieste. Allo scopo di ottenere coefficienti di attrito stabili e basse usure, con conseguenti basse emissioni di particolato e basso consumo di materiali, è essenziale lo studio a livello microscopico dei fenomeni di attrito. L'usura dei materiali è</p>

controllata dalla formazione del Tribolayer a seguito di processi meccanochimici all'interfaccia. Un tribolayer uniforme è essenziale per ottenere un attrito stabile, usure basse, basse emissioni di vibrazioni. La scelta di materiali alternativi a basso impatto sarà guidata da uno studio del Tribolayer e la correlazione della composizione e morfologia di questo con la composizione dei materiali d'attrito e della controsuperficie. Il/la candidat* dovrebbe possedere competenze nell'ambito della tribologia dei materiali d'attrito sviluppate durante la tesi magistrale o tramite esperienze in enti di ricerca.

The automotive industry is facing enormous challenges in terms of sustainability, with the need to decrease emissions, resource depletion, energy consumption and the impact on ecosystems throughout the product life cycle. The transport sector is responsible for about 55% of fine particulate emissions (PM2.5) globally, of which 21% currently derives from wear particles (tires, brakes). The aim of this project is the development of low environmental impact composites for friction brakes. The first objective will be to improve the eco-sustainability of brake pads throughout their life cycle. The study will be carried out with the aim of decreasing the depletion of non-renewable resources and introducing eco-sustainable and renewable materials (e.g. replacement of phenolic resins with biobased resins or geopolymers binders). The improvement of sustainability will be pursued through detailed studies of Life Cycle Analysis and the choice of alternative (nano) materials with low environmental impact starting from the required tribological properties. In order to obtain stable friction coefficients and low wear, with consequent low particulate emissions and low material consumption, the microscopic study of friction phenomena is essential. The wear of the materials is controlled by the formation of the Tribolayer as a result of mechanochemical processes at the interface. A uniform tribolayer is essential to achieve stable friction, low wear, low vibration emissions. The choice of alternative low-impact materials will be guided by a study by the Tribolayer and the correlation of the composition and morphology of this with the composition of the friction materials and the counter-surface. The candidate should have skills in the tribology of friction materials developed during the master's thesis or through experience in research institutions.

Cristina Prandi

Revisione dei processi sintetici di APIs in chiave sostenibile: solventi green e biocatalisi / *Review of synthetic APIs processes in a sustainable key: green solvents and biocatalysis*

Il presente progetto di ricerca ha come obiettivo quello di rendere più sostenibili i processi sintetici industriali, e si articola in due linee. (1) Utilizzo di solventi organici non convenzionali nelle sintesi in modo da ridurre e progressivamente eliminare completamente l'uso di VOC e di solventi clorurati. (2) Utilizzo della catalisi enzimatica per la produzione di molecole d'interesse industriale, operando in condizioni di basso consumo energetico ed elevata efficienza e selettività. Partner industriale del progetto è Huvepharma Italia Srl, azienda chimico-farmaceutica con stabilimento produttivo situato sul territorio piemontese (Garessio, CN) che ha inserito tra gli obiettivi del proprio piano di sviluppo strategico l'ottimizzazione dei propri processi produttivi nell'ottica di renderli più efficaci, efficienti e sostenibili e la costituzione di un centro di eccellenza di principi attivi ad alto valore aggiunto e basso volume per minimizzare l'impatto ambientale.

Obiettivo finale del progetto è quello di introdurre delle innovazioni tecnologiche sia incrementali sia radicali nel sistema di trasformazione industriale, con l'intento di aumentare la competitività e intensificare i processi produttivi mediante un approccio sostenibile, orientato a ottimizzare i processi di sintesi chimica in continuo e quelli di reazione enzimatica. Infine, si cercherà di favorire il passaggio dalla ricerca e sviluppo alla produzione pilota e su scala industriale, di cui l'azienda proponente possiede tutte le expertise, mirato alla ovvia valorizzazione economica dei risultati della ricerca e l'ottenimento di processi industriali innovativi e validati, in grado di ridurre notevolmente i tempi di ingresso sul mercato di riferimento.

Il progetto intende inoltre realizzare un obiettivo di formazione professionale avanzata con un possibile inserimento in azienda del Dottorando di Ricerca, che svilupperà il proprio progetto di ricerca principalmente in Università e sarà in grado di trasferire all'azienda il know-how acquisito (in accademia e all'estero) durante i mesi previsti dal progetto, per affrontare un settore altamente competitivo quale è quello farmaceutico.

Il/la candidato/a deve avere una esperienza nella sintesi organica, con particolare riferimento alle reazioni condotte con reagenti organometallici ed avere una buona conoscenza della lingua inglese parlata e scritta.

This research project aims to make industrial synthetic processes more sustainable, and is divided into two main lines. (1) Use of unconventional organic solvents in syntheses in order

		<p><i>to reduce and progressively completely eliminate the use of VOCs and chlorinated solvents.</i></p> <p><i>(2) Use of enzymatic catalysis for the production of molecules of industrial interest, operating in conditions of low energy consumption and high efficiency and selectivity. Industrial partner of the project is Huvepharma Italia Srl, a chemical-pharmaceutical company with a production plant located in the Piedmont area (Garessio, CN) which has included among the objectives of its strategic development plan the optimization of its production processes in order to make them more effective, efficient and sustainable and the establishment of a center of excellence of active ingredients with high added value and low volume to minimize the environmental impact.</i></p> <p><i>The final objective of the project is to introduce both incremental and radical technological innovations in the industrial transformation system, with the aim of increasing competitiveness and intensifying production processes through a sustainable approach, aimed at optimizing chemical synthesis processes and enzymatic reaction. Finally, we will try to encourage the transition from research and development to pilot production on an industrial scale, of which the proposing company has all the expertise, aimed at the obvious economic exploitation of research results and the achievement of innovative and validated industrial processes, able to significantly reduce the time to enter the reference market.</i></p> <p><i>The project also intends to achieve an objective of advanced professional training with a possible insertion in the company of the PhD student, who will develop his research project mainly at the University and will be able to transfer the acquired know-how to the company (in the academy and abroad) during the months foreseen by the project, to face a highly competitive sector such as the pharmaceutical one.</i></p> <p><i>The candidate must have experience in organic synthesis, with particular reference to reactions conducted with organometallic reagents and a good knowledge of spoken and written English.</i></p>
Mery Malandrino	Sistemi frenanti a basso impatto ambientale per la mobilità del futuro /	La qualità dell'aria desta elevata preoccupazione in Europa. Il traffico veicolare fornisce un contributo significativo alle emissioni degli inquinanti atmosferici. Oggigiorno le emissioni non esauste (da usura di freni e pneumatici, abrasione della strada e risospensione) rappresentano il principale contributo al PM emesso dal traffico veicolare.

Risulta, quindi, imperativo valutare l'efficienza di coppie tribologiche (pastiglia freno e rotore) innovative considerando il loro contributo alle emissioni non esauste.

Il progetto sarà svolto in collaborazione con l'azienda ITT SRL.

Il progetto si articolerà nelle seguenti fasi:

Fase 1 – Test su coppie tribologiche

- Test su banco dinamometrico di differenti coppie tribologiche per le principali tipologie di veicoli. Campionamento del PM emesso separato in funzione delle differenti classi dimensionali.

- Test su strada delle coppie tribologiche più performanti.

Fase 2 – Analisi delle emissioni atmosferiche

- Determinazione di metalli e contaminanti organici e conteggio del numero di particelle nel PM emesso dalle coppie tribologiche testate su banco dinamometrico e su strada.

Fase 3 – Valutazione dell'impatto ambientale

- Trattamento dei dati con tecniche statistiche multivariate allo scopo di identificare le coppie tribologiche più performanti in termini di efficienza e sostenibilità ambientale.

L'obiettivo principale del progetto è ridurre l'impatto ambientale dei sistemi frenanti diminuendo le emissioni di PM e del suo carico inquinante per soddisfare lo standard "EU Super Low Emission Vehicles".

Il principale risultato atteso è l'ottimizzazione di coppie tribologiche per 3 tipi di veicoli a motore (a combustione interna, elettrico e ibrido) e 3 categorie di veicoli (auto di medie dimensioni, Sport Utility Vehicles (SUV) e veicoli commerciali leggeri), in grado di minimizzare le emissioni di PM ed il loro contenuto in inquinanti inorganici ed organici e massimizzare le prestazioni dell'impianto frenante.

Air quality represents a very critical environmental concern in Europe. Vehicular traffic provides a significant contribution to the emissions of atmospheric pollutants. Nowadays, non-exhaust emissions (from brake and tire wear, road abrasion and resuspension) are the main contributor to traffic-related PM.

It is therefore imperative to evaluate the efficiency of innovative tribological couples (brake pad and rotor) considering their contribution to non-exhaust emissions.

		<p><i>The project will be carried out in collaboration with the ITT SRL company.</i></p> <p><i>The project will be divided into the following phases:</i></p> <p><i>1 - Test on tribological couples</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>Dyno bench test of different tribological couples for the main types of vehicles. Sampling of the PM emitted separated according to the different dimensional classes.</i> - <i>Road test of the most performing tribological couples.</i> <p><i>2 - Analysis of atmospheric emissions</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>Determination of metals and organic contaminants and counting of the number of particles in the PM emitted by the tribological couples tested on dyno bench and on the road.</i> <p><i>3 - Environmental impact assessment</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>Data treatment by multivariate statistical techniques in order to identify the most performing tribological couples in terms of efficiency and environmental sustainability.</i> <p><i>The main objective of the project is to reduce the environmental impact of the braking systems by decreasing the emissions of PM and its pollutant load to meet the "EU Super Low Emission Vehicles" standard.</i></p> <p><i>The main expected result is the optimization of tribological couples for 3 types of motor vehicles (internal combustion, electric and hybrid) and 3 categories of vehicles (midsize cars, Sport Utility Vehicles (SUVs) and light commercial vehicles), able to minimize PM emissions and their content in inorganic and organic pollutants and maximize the performance of the braking system.</i></p>
<p>Marcello Baricco</p>	<p>Idruri in batterie allo stato solido per l'industria automotive / <i>Hydrides in solid state batteries for the automotive industry</i></p>	<p>Uno degli obiettivi principali nell'attuale ricerca sulle batterie per applicazioni in campo automotive è aumentare la sicurezza e la densità di energia. Gli elettroliti a stato solido potranno migliorare la sicurezza, la durata, la stabilità termica e la capacità delle future batterie per l'automotive. In questo progetto, verranno studiate le possibili correlazioni tra le strutture cristalline di solidi inorganici e la loro conduttività ionica, al fine di raggiungere una comprensione approfondita dei meccanismi di mobilità ionica nelle batterie allo stato solido. In particolare, il progetto mira a studiare materiali innovativi a base di idruro come elettroliti per le batterie allo stato solido, basate su ioni di litio o di altri metalli (Na, Mg).</p>

Inoltre, verranno studiati anodi innovativi a base di idruri per fornire una capacità specifica più elevata rispetto a quelli commerciali.

- Sintesi e caratterizzazione di materiali ad alta conduttività ionica, stabili a temperatura ambiente.
- Sintesi e caratterizzazione di anodi a base di idruri.
- Progresso nella comprensione della struttura dell'interfaccia e della termodinamica in sistemi complessi multifase basati su idruri.
- Analisi delle potenzialità tecnico-economiche e degli impatti sull'ambiente, sul ciclo di vita e sulla sostenibilità dei sistemi a base di idruro per applicazioni nei sistemi di accumulo di energia in campo automotive.

Il/la candidato/a deve avere conoscere le principali tecniche sperimentali per la sintesi (chimica, macinazione meccanica, trattamenti termici) e caratterizzazione (diffrazione, microscopia, analisi termica, spettroscopie varie) dei materiali. Fondamenti delle tecniche di modellizzazione dei materiali. Conoscenza della lingua inglese

One of the main objectives in current research on batteries for automotive applications is to increase safety and energy density. Solid-state electrolytes will improve the safety, durability, thermal stability and capacity of future automotive batteries. In this project, possible correlations between the crystal structures of inorganic solids and their ionic conductivity will be investigated, in order to achieve an in-depth understanding of ion mobility mechanisms in solid state batteries. In particular, the project aims to study innovative hydride-based materials as electrolytes for solid-state batteries, based on lithium ions or other metals (Na, Mg). Furthermore, innovative anodes based on hydrides will be investigated to provide a specific capacity higher than commercial ones.

- *Synthesis and characterization of materials with high ionic conductivity, stable at room temperature.*
- *Synthesis and characterization of hydride-based anodes.*
- *Progress in understanding the interface structure and thermodynamics in complex multiphase systems based on hydrides.*

		<ul style="list-style-type: none"> • <i>Analysis of the technical-economic potential and the impacts on the environment, on the life cycle and on the sustainability of hydride-based systems for applications in energy storage systems in the automotive field.</i> <p><i>The candidate should know the experimental techniques for the synthesis (chemical, ball milling, thermal treatments) and characterization (diffraction, microscopy, thermal analysis, spectroscopies) of materials. Fundamentals of materials modelling techniques. Good knowledge of spoken/written English</i></p>
<p>Claudio Baggiani / Maria Concetta Bruzzoniti</p>	<p>Polimeri a stampo ionico come strategia sostenibile per il recupero efficiente di ioni litio da soluzioni diluite / <i>Ion-imprinted polymers as a sustainable strategy for the efficient recovery of lithium ions from dilute solutions</i></p>	<p>Le batterie agli ioni litio costituiscono un punto critico per garantire lo sviluppo sostenibile delle società post-industriali. La domanda di sali di origine geologica supererà la produzione dalle fonti minerarie non oltre il 2025. Il recupero del litio dalle batterie esaurite rappresenta quindi una alternativa obbligata all'accesso alla fonte primaria. Le tecnologie attualmente disponibili per il recupero del litio dalle acque di lisciviazione sono ambientalmente impattanti, scarsamente efficienti e poco sostenibili. E' quindi di grande interesse la messa a punto di metodi innovativi per l'estrazione selettiva di ioni litio da soluzioni diluite.</p> <p>La proposta progettuale intende ideare e preparare polimeri reticolati a stampo ionico, studiarne le proprietà di legame verso gli ioni litio e valutarne l'applicabilità per l'estrazione diretta litio da soluzioni di liscivia. Il progetto si articola come segue: i) sintesi in bulk di polimeri a stampo ionico, con valutazione delle proprietà leganti verso lo ione litio ii) ottimizzazione della composizione polimerica e scale-up della sintesi iii) ottimizzazione della metodica di recupero dello ione litio da soluzioni di liscivia.</p> <p>Il principale risultato atteso consiste nella preparazione di polimeri a stampo ionico con proprietà di riconoscimento molecolare selettive verso lo ione litio, capaci di estrarre direttamente e senza aggiunta di alcun reagente supplementare detto ione da soluzioni diluite derivanti dal processo di lisciviazione delle batterie. Tali polimeri devono essere adatti a trattare elevati volumi di acque di lisciviazione, permettendo l'estrazione e la preconcentrazione di ioni litio da soluzioni con concentrazione dell'ordine di grandezza delle decine di mM con caratteristiche di elevata resa e purezza.</p>

Competenze richieste: buona conoscenza delle metodologie di stampo molecolare, delle tecniche di misura delle proprietà leganti dei polimeri e delle principali tecniche di analisi cromatografica.

Lithium-ion batteries are a critical point in ensuring the sustainable development of post-industrial societies. The demand for salts of geological origin will exceed production from mining sources no later than 2025. The recovery of lithium from exhausted batteries therefore represents an obligatory alternative to access to the primary source. The technologies currently available for the recovery of lithium from leaching waters are environmentally impacting, scarcely efficient and unsustainable. The development of innovative methods for the selective extraction of lithium ions from dilute solutions is therefore of great interest.

The project proposal intends to design and prepare ion-imprinted cross-linked polymers, study their binding properties to lithium ions and evaluate their applicability for direct lithium extraction from leaching waters. The project is structured as follows: i) bulk synthesis of ion-imprinted polymers, with evaluation of the binding properties towards lithium ion. ii) optimization of the polymer composition and scale-up of the synthesis. iii) optimization of the lithium ion recovery method from leaching waters.

The main expected results consist in the preparation of ion-imprinted polymers with molecular recognition properties selective towards lithium ion, capable of extracting directly and without any additional reagent lithium from dilute solutions deriving from the battery leaching process. These polymers must be suitable for treating high volumes of leaching water, allowing the extraction and preconcentration of lithium ions from solutions with a concentration of the order of magnitude of tens of mM with characteristics of high yield and purity.

Skills required: good knowledge of molecular imprinting principles and methodologies, of techniques for measuring the binding properties of polymers and of the main liquid chromatography analytical techniques.

Paola Rizzi

Strategie innovative per la ingegnerizzazione di sensori per il settore sostenibilità alimentare / *Innovative strategies for the engineering of sensors for a sustainable food system*

In un obiettivo di sviluppo sostenibile e limitazione degli impatti ambientali legati all'allevamento intensivo di bestiame, il presente progetto intende sviluppare nuovi metodi di monitoraggio di farine proteiche da insetti, attualmente in fase di sperimentazione per cui non vi sono metodi di controllo in fase di produzione. Il progetto intende quindi sviluppare un biosensore innovativo per la determinazione di biomarker di contenuto proteico o di allergeni.

Il sensore si basa su un elemento sensibile costituito da oro nanoporoso, un materiale innovativo ad alta attività elettrocatalitica. Si propone un processo di produzione sostenibile tramite l'uso di Fe (elemento non presente fra i Critical Raw Materials). Il materiale a fine vita potrà essere recuperato interamente e riprocessato in modo da generare un nuovo elemento sensibile in un'ottica di economia circolare. Il materiale sarà funzionalizzato per la rilevazione delle molecole di interesse partendo da leganti selettivi di origine naturale o sintetica, studiando i parametri che determinano la sensibilità e specificità della misura, per ottenere una elevata sensibilità limitando i fattori di disturbo legati alla composizione delle matrici (polvere da insetti). Infine l'elemento sensibile sarà implementato in un Lab-on Chip microfluidico in cui si possono eseguire interi protocolli analitici e le analisi dei segnali.

L'obiettivo è di produrre un prototipo di facile utilizzo che consenta la sua applicazione da personale non specialista, cioè direttamente dal produttore di farine da insetti, che potrà ottenere le informazioni necessarie per la verifica online della qualità del prodotto e quindi per la sua gestione in ottica di ottimizzare i processi produttivi.

Il candidato dovrà avere competenze nell'ambito della sintesi di materiali innovativi, con le conoscenze della scienza dei materiali e della chimica necessarie per la preparazione di leghe metalliche e la loro funzionalizzazione.

Insect meal represents an alternative and sustainable protein source that can help in the reduction of the environmental impact of intensive livestock farming. Insect meals are at a development stage and, therefore, new methods of monitoring are needed. In this project an innovative biosensor for the determination of biomarkers of protein content or allergens will be developed.

The sensor is based on a sensitive element consisting of nanoporous gold, an innovative material with high electrocatalytic activity. A sustainable production process is proposed

		<p><i>through the use of Fe, not present in the number of Critical Raw Materials. The material at the end of its life can be recovered entirely and reprocessed in order to generate a new sensitive element in a circular economy perspective. The nanoporous Au will be functionalized for the detection of the molecules of interest starting from selective ligands that could be natural or synthetic. Parameters determining the sensitivity and specificity of the measurement will be studied, to obtain high sensitivity by limiting the factors linked to the composition of the matrices. Finally, the sensitive element will be implemented in a microfluidic Lab-on Chip in which analytical protocols will be performed together with the analysis of the signals.</i></p> <p><i>The final goal is to produce an easy-to-use prototype that allows its application by non-specialists, (i.e. directly from the insect meal manufacturer) who will be able to obtain the information necessary for online verification of the quality of the product and therefore for its management, with a view to optimizing production processes.</i></p> <p><i>The candidate must have skills in the synthesis of innovative materials, with the knowledge of materials science and chemistry necessary for the synthesis of metal alloys and their functionalization.</i></p>
Valentina Crocellà	<p>Sviluppo di materiali compositi per la separazione dell'anidride carbonica / <i>Development of composite materials for the separation of carbon dioxide</i></p>	<p>I processi di separazione e purificazione dei prodotti chimici sono responsabili del 15% del consumo energetico mondiale, perciò qualsiasi miglioramento della loro efficienza consentirebbe di limitare le emissioni di gas serra e di ridurre il consumo energetico. La maggior parte dei processi di separazione di miscele gassose con rilevanza industriale prevedono la rimozione dell'anidride carbonica (CO₂). L'utilizzo delle membrane è una delle tecnologie emergenti in questo settore. Le membrane a matrice mista (MMM), composte da un riempitivo poroso cristallino disperso in una matrice polimerica, sono state riconosciute come promettenti membrane di nuova generazione, dato che hanno prestazioni nettamente superiori alle membrane commerciali.</p> <p>Questo progetto mira a sviluppare nuove MMM basate su strutture metallo-organiche (MOF) capaci di catturare selettivamente la CO₂ anche in presenza di acqua. Il dottorando si interfacerà con diverse realtà di ricerca e con un'azienda interessata allo sviluppo di nuovi materiali sostenibili. Il progetto si articolerà in varie fasi: sintesi di nuovi MOF, studio delle loro proprietà adsorbenti e preparazione di MMM. I materiali saranno caratterizzati</p>

con un approccio multi-tecnica per selezionare i più promettenti per i test di cattura di CO₂ e per scegliere i materiali adsorbenti migliori da utilizzare infine come riempitivi nelle MMM. Durante il periodo in azienda il dottorando svilupperà un setup per lo studio della capacità di cattura di CO₂, mentre durante il terzo anno trascorrerà un periodo presso il CNR-ITM per preparare le MMM e testarne le proprietà di permeazione.

Il candidato deve avere solide basi di chimica e di scienza dei materiali e una buona conoscenza della lingua inglese. Il candidato deve inoltre possedere buone conoscenze di spettroscopia Uv-Vis e IR in situ per la caratterizzazione di materiali e di volumetria e microcalorimetria per lo studio delle proprietà adsorbenti di materiali porosi.

The processes for separation and purification of chemical products accounts for 15% of the world energy consumption, therefore any improvement in their efficiency would limit greenhouse gas emissions and reduce energy consumption. Most of the separation processes of gas mixtures with industrial relevance involves the removal of carbon dioxide (CO₂). The use of membranes is one of the emerging technologies in this field. Mixed matrix membranes (MMMs), composites constituted by a crystalline porous filler dispersed in a polymer matrix, have been recognized as promising next-generation membranes, as they outperform commercially available membranes.

This PhD project aims to develop new MMMs based on metal-organic frameworks (MOFs) to selectively capture CO₂ even in the presence of water. The PhD student will collaborate with different research teams and with a company interested in the development of new materials for sustainable applications. The project involves several steps: synthesis of new MOFs, study of their adsorption features and preparation of MMM. Materials will be characterized with a multi-technique approach to select the most promising ones for CO₂ capture measurements and to choose the best adsorbents to be finally employed as fillers in MMMs. During the collaboration with the company the PhD student will develop a new setup for the study of the CO₂ capture capacity, while during the third year he/she will spend a period at the CNR-ITM to prepare the MMMs and test their permeation properties.

The candidate must possess a solid background of chemistry and materials science and a good knowledge of English. The candidate must also have good knowledge of UV-Vis and

		<p><i>in situ IR spectroscopies for the characterization of materials and of volumetry and micro-calorimetry for the study of the adsorbing properties of porous materials.</i></p>
<p>Valentina Brunella/ Marta Corno</p>	<p>Development of an eco-friendly Drug Delivery System cyclodextrin-based, accompanied by a descriptive computational model / <i>Development of an eco-friendly Drug Delivery System cyclodextrin-based, accompanied by a descriptive computational model</i></p>	<p>Il progetto è incentrato sullo sviluppo di un sistema di rilascio controllato di farmaci (DDS), non inquinante e non pericoloso, associate con uno studio computazionale specifico che mira a creare un modello per la descrizione teorica. Per la creazione di un'applicazione pratica e l'approvazione del materiale è stata coinvolta un'azienda specializzata. Infatti, grazie alle conoscenze in campo applicativo, normativo e tecnologico, la parte industriale svolgerà un ruolo attivo nella ricerca. L'intero progetto può essere diviso in due diverse linee di ricerca parallele, quella sperimentale/sintetica e quella teorica/computazionale. Sperimentalmente, le ciclodestrine saranno utilizzate tal quali o nella forma reticolata di nanopugne. La reazione di reticolazione avviene senza la presenza di solventi organici, ma solo in acqua, minimizzando così i processi di pulizia e purificazione. Le possibili applicazioni sono rappresentate dalla formulazione di una crema cosmetica, spray o pillole contenenti i DDS, che mostreranno i migliori risultati nella modulazione del rilascio delle molecole attive. Per la parte computazionale, inizialmente l'obiettivo è quello di definire una metodologia accurata e, allo stesso tempo, a basso costo per indagare questi complessi, verso una comprensione dei principali fattori che determinano l'interazione host-guest e l'efficacia del sistema DDS. Successivamente, lo studio cercherà una correlazione tra i dati sperimentali e quelli calcolati, in modo da essere autoconsistente con gli spettri IR e con la forza di interazione misurata tra il farmaco e la nanopugna. Inoltre, la creazione di un modello teorico di nanopugna sarà l'ultimo obiettivo dello studio, in modo da poter prevedere proprietà, spettri ed energie di legame che altrimenti dovrebbero essere misurate sperimentalmente.</p> <p>Il dottorando deve avere conoscenze nel campo dei materiali polimerici e della chimica computazionale.</p> <p><i>The project is focused on the development of an eco-friendly and non-hazardous Drug Delivery System (DDS), accompanied by a specific computational study that aims to create a model for the theoretical description. For a real application and approval of the drug</i></p>

		<p><i>delivery system a specialized company is involved. In fact, thanks to the knowledge on the applicative, regulatory and technological fields, the project can be raised with an active participation in its industrial part. The entire project can be divided into two different parallel research lines, the experimental/synthetic and the theoretical/computational. Experimentally Cyclodextrins will be used as such or in the crosslinked form of nanosponge. The crosslinking reaction occurs without the presence of organic solvents, but only in water, thus minimizing the cleaning and purification processes. Possible applications in DDS are represented by the formulation of a cosmetic cream, spray or pills with the presence of the samples that demonstrates the best results in release modulation of the chosen drugs. For the computational part, initially the aim is to define a robust, accurate and, at the same time, low-cost methodology to investigate these complexes, towards an understanding of the main factors determining the host-guest interaction and the efficacy of the drug-delivery system. Subsequently, the study will look for a correlation between experimental and computed data, so as to be self-consistent with the IR spectra and with the strength of interaction measured between the guest molecules and the host. Furthermore, the creation of the nanosponge model will be the last focus of the study, thus resulting in the ability to predict properties, spectra and binding energies that would otherwise have to be measured experimentally.</i></p> <p><i>The Ph.D student must have knowledge in the field of both polymeric materials and computational chemistry.</i></p>
Carlo Nervi	Riduzione Elettrochimica del Biossido di Carbonio / <i>Electrochemical Reduction of Carbon Dioxide</i>	<p>Circa l'85% dell'energia mondiale è attualmente ottenuta dalla combustione di risorse fossili. Le emissioni antropiche di CO₂ in atmosfera hanno raggiunto il valore di circa 37 Gton/anno, risultando una delle cause primarie del riscaldamento globale e del cambiamento climatico. Per tenere sotto controllo la concentrazione di CO₂, è urgente trovare un modo efficace per convertire la CO₂ in combustibili rinnovabili e sostenibili. Ad esempio, la tecnologia fotovoltaica può convertire l'energia intermittente del sole in energia elettrica, che può essere utilizzata per la riduzione elettrochimica della CO₂ in combustibili o precursori di combustibili, mitigando così le emissioni di carbonio e tentando di chiudere il ciclo del carbonio come vettore energetico.</p>

Il dottorato è una collaborazione tra ricerca (Università) e industria (Hysytech), con l'obiettivo di colmare il divario tra l'accademia e le applicazioni del mondo reale. Il primo partner ha esperienza di ricerca di nuovi catalizzatori molecolari basati su metalli a basso costo e alta abbondanza naturale, che saranno legati chimicamente alla superficie dell'elettrodo per la conversione elettrochimica della CO₂ in prodotti ad alto valore aggiunto (come CO, formiato o metanolo). Il già noto catalizzatore a base di Mn sarà la scelta di partenza per mettere a punto lo sviluppo di una cella elettrochimica utilizzando solventi puliti (tipicamente acqua). L'iniziale uso in laboratorio verrà esteso con l'obiettivo di applicazioni industriali. Hysytech ha l'esperienza nello sviluppo e nella costruzione di tali dispositivi.

Il dottorando dovrà possedere preferibilmente la conoscenza delle tecniche elettrochimiche, esperienza nella sintesi inorganica ed organometallica, e la conoscenza delle tecniche normalmente impiegate per la caratterizzazione e lo studio di tali sistemi (quali NMR, spettroelettrochimica, gascromatografia, ecc.). Costituisce titolo preferenziale la conoscenza della lingua italiana e inglese.

About 85% of the world's primary energy supply is currently obtained by the combustion of fossil fuels. As a result, anthropogenic CO₂ emissions into the atmosphere have reached the value of about 37 Gt/y, which is one of the primary causes of global warming and climate change. To keep the concentration of CO₂ under control, it is urgent to find an effective way for converting CO₂ into renewable and sustainable fuels. For example, photovoltaic technology can convert the intermittent energy from the sun into renewable electric energy, which can be used for electrochemical reduction of CO₂ into fuels or fuel precursors, thus mitigating the carbon emissions and attempting to close the carbon cycle as energy vector. The PhD is a collaboration between research (University) and industry (Hysytech), with the aim of closing the gap between academy and the real-world applications. The first partner will perform the necessary research, based on previous experience. Earth-abundant low-cost molecular catalysts will be chemically bonded to the electrode surface for electrochemical conversion of CO₂ into valuable chemicals (as CO, formate or methanol). The already known Mn-based catalyst will be the starting choice for tuning the development of an electrochemical cell using green solvents (typically water) suitable first for laboratory

		<p><i>scale and later for possible industrial applications. Hysytech has the experience of developing and building such devices.</i></p> <p><i>The PhD candidate should preferentially have the knowledge of electrochemical techniques, inorganic and organometallic synthetic experience, and knowledge of the techniques normally employed for the characterization and the study of these systems (like NMR, spectroelectrochemistry, gas chromatography, etc..). Knowledge of Italian and English languages are preferred.</i></p>
<p>Federico Cesano / Valentina Brunella</p>	<p>Carbon-based polymers nanocomposite conductive materials for integrated metal-free cabling and sensing in automotive / <i>Conductive carbon-based polymer nanocomposite materials for integrated metal-free cabling and sensing in the automotive sector</i></p>	<p>Il settore dei trasporti è uno dei responsabili dell'inquinamento e delle emissioni di gas serra. Poiché l'UE ha fissato obiettivi ambiziosi per ridurre tali emissioni, per i veicoli della prossima generazione saranno necessari nuovi materiali, più leggeri e riciclabili.</p> <p>L'idea alla base di questo studio è di ridurre l'impatto ambientale dei componenti in plastica delle auto utilizzando compositi polimerici che hanno percorsi conduttivi ottenuti mediante il trattamento laser. L'obiettivo principale è quello di sviluppare una tecnologia verde in grado di: i) sostituire i cablaggi metallici con materiali completamente riciclabili contenenti cariche di carbonio conduttive; ii) diminuire il peso con la conseguente riduzione delle emissioni di CO2 e iii) consentire nuove strategie per il riciclaggio dei componenti a fine vita. I risultati attesi dello studio si focalizzano sull'attivazione locale di compositi polimerici "bulk" che diventano localmente conduttivi grazie al trattamento laser localizzato. L'uso di nanostrutture di carbonio come riempitivi nei polimeri, compreso il biochar ottenuto dalla pirolisi, è conforme ai principi dell'economia circolare. Altri riempitivi, come i nanotubi di carbonio (CNT), strutture simili al grafene (cioè ossido di grafene, ossido di grafene ridotto, nanoplatelet di grafene) saranno utilizzati per la preparazione di compositi polimerici. Sarà adottato un approccio multidisciplinare per studiare la morfologia, la struttura, la conducibilità elettrica in condizioni statiche e dinamiche (cioè le proprietà piezoresistive), le proprietà meccaniche, termiche e reologiche. Verranno considerati gli effetti del filler sui parametri di irradiazione laser. Sulla base delle suddette proprietà, sarà realizzato un modulo cruscotto con cablaggio integrato e con capacità di controllo.</p> <p>Sono richieste al candidato competenze multidisciplinari per maneggiare i nanomateriali sia in ambito accademico che industriale e la conoscenza della lingua inglese.</p>

The transport sector is a major source of pollution and greenhouse gas emissions. As the EU commission settled ambitious targets to reduce those emissions, new lightweight and recyclable materials will be needed for the next generation vehicles.

The idea behind this study is to reduce the environmental impact of plastic components of cars by using polymer composites that have conductive paths obtained by laser treatment.

The main objective is to develop a green technology able to: i) Cu cable replacing with fully recyclable materials containing conductive C fillers; ii) weight decrease with the consequent reduction of fuel consumption/CO2 emissions and iii) enable new simplified strategies for recycling end-of-life components. The expected results of the study entail the local activation of "bulk" nanocarbon-based polymer composites, which become locally electrically conductive without using metal wires by the local laser treatment. The use of nanocarbons as conductive fillers in polymers, including carbonaceous fillers and biochar obtained through pyrolysis matches with the circular economy principles. Other fillers, such as carbon nanotubes (CNTs), graphene-like structures (i.e. graphene oxide, reduced graphene oxide, graphene nanoplatelets) will be used for the preparation of polymer compounds. A multidisciplinary approach will be adopted to investigate the morphology, structure, electrical conductivity under static and dynamic conditions (i.e. piezoresistive properties), mechanical, thermal and rheological properties. Material functionalization will be performed and the effects of fillers on the laser irradiation parameters will be considered. Based on the aforementioned properties, a dashboard module with integrated cabling and sensing/switching capabilities will be realized.

Multidisciplinary competences to handle nanomaterials in both academic and industrial settings, and knowledge of English are skills required for the candidate.