

Documento aggiornato in data 21/06/2023
Correzioni o aggiornamenti sono riportati in rosso

Document updated on 21/06/2023
Amendments or updates are in red

ALLEGATO 1 / ANNEX 1

Corso di Dottorato in Scienze Chimiche e dei Materiali

PhD Programme in Chemical and Materials Sciences

Coordinatore / Coordinator	Prof. Bartolomeo CIVALLERI
Email Coordinatore/Coordinator's email	bartolomeo.civalleri@unito.it
Dipartimento / Department	Chimica
Durata Corso di Dottorato / Programme Length	3 anni / 3 years
Sito web Corso di Dottorato / Programme website	https://dott-scm.campusnet.unito.it/do/home.pl
Data inizio attività / Programme start date	1° Novembre 2023 / 1 st November 2023
Strutture / Departments	Dipartimento di Chimica / <i>Department of Chemistry</i> Dipartimento di Fisica / <i>Department of Physics</i> Dipartimento di Biotecnologie Molecolari e Scienze della Salute / <i>Department of Molecular Biotechnology and Health Sciences</i>

Totali posti disponibili: n. 30, di cui n. 2 posti riservati ai/lle laureati/e all'estero / Total number of available positions: no. 30, of which no. 2 reserved to candidates holding a foreign degree	
BORSE D.M. 117/2023 DOTTORATI INNOVATIVI CHE RISPONDANO AI BISOGNI DI INNOVAZIONE DELLE IMPRESE (M4C2 I. 3.3) PhD IN COOPERATION WITH INDUSTRIAL PARTNERS (M4C2 I. 3.3)	
N. 9 posti con borsa DM 117/2023 / No. 9 positions with D.M. 117/2023 scholarships¹	Di cui / Of which: - n. 9 borse M4C2 I. 3.3 (vincolate a progetti n. 1, 2, 3, 4, 21, 22, 23, 24 e 25) / no. 9 M4C2 I. 3.3 scholarships (bound to projects no. 1, 2, 3, 4, 21, 22, 23, 24 and 25);
BORSE D.M. 118/2023 TRANSIZIONI DIGITALI E AMBIENTALI (M4C1 I. 3.4) RICERCA PNRR , PUBBLICA AMMINISTRAZIONE E IL PATRIMONIO CULTURALE (M4C1 I. 4.1) DIGITAL AND ENVIRONMENTAL TRANSITIONS (M4C1 I. 3.4) NRRP RESEARCH, PUBLIC ADMINISTRATION AND CULTURAL HERITAGE (M4C1 I. 4.1)	
N. 1 posti con borsa DM 118/2023 / No. 1 positions with D.M. 118/2023 scholarships²	Di cui / Of which: - n. 1 borse M4C1 I. 4.1 (vincolate a progetti n.5 / no. 1 M4C1 I. 4.1 scholarships (bound to projects no. 5)
BORSE PNRR NRPP SCHOLARSHIP	
N. 2 posti con borsa PNRR Missione 4, componente 2 / Nr. 2 positions with NRPP scholarship³	Di cui / Of which: - n. 2 borse Centri Nazionali- CN1 (collegate a progetti n. 6 e 7) / no. 2 National Centres scholarships - NCs1 (bound to projects no. 6 and 7)
POSTI ORDINARI STANDARD POSITIONS	
N. 13 posti con borsa di studio / No. 13 PhD scholarships⁴	Di cui / Of which: - n. 9 borse di Ateneo / No. 9 PhD scholarships funded by the University of Torino;

¹ Si noti che le borse D.M. 117/2023 sono vincolate alla presentazione di progetti specifici, i cui titoli sono elencati al fondo del documento / Please, note that D.M. 117/2023 scholarships are bound to specific projects listed at the end of the sheet.

² Si noti che le borse D.M. 118/2023 sono vincolate alla presentazione di progetti specifici, i cui titoli sono elencati al fondo del documento / Please, note that D.M. 118/2023 scholarships are bound to specific projects listed at the end of the sheet.

³ Si noti che le borse PNRR sono vincolate alla presentazione di progetti specifici, i cui titoli sono elencati al fondo del documento / Please, note that NRPP scholarships are bound to specific projects listed at the end of the sheet.

	- n. 2 borsa finanziata da INRIM (vincolata a progetto n. 19 e 26) / <i>no. 2 scholarship funded by INRIM (bounded to project no. 19 and no. 26);</i> - n. 1 borsa finanziata da borsa finanziata dal Dipartimento di Chimica su fondi provenienti da progetto europeo H2020 ERC Starting Grant "NAPUE" (collegata a progetto n. 18) / <i>No. 1 scholarships funded by H2020 ERC Starting Grant "NAPUE" (bound to project no. 18);</i> - n. 1 borsa finanziata da ENEA (collegata a progetto n. 20) / <i>no. 1 scholarship by ENEA (bound to project no. 20);</i>
N. 1 posto riservato a dipendenti di impresa o enti pubblici / <i>no. 1 position reserved to employees from a private company or a public institution</i>	di cui / of which: - n. 1 posto riservato a dipendenti dell'impresa: Procos S.p.A (vincolato a progetto n. 17) . / <i>no. 1 position reserved to employees from the company: Procos S.p.A (bound to project no. 17)</i>
ALTRI POSTI OTHER POSITIONS	
N. 2 posti riservati a studenti selezionati nell'ambito di specifici programmi di mobilità internazionale o banditi nell'ambito di accordi specifici a cui l'Università di Torino partecipa: "101119555-IN2AQUAS-HORIZON–MSCA –2022-DN-JD Human footprint on water from remote cold areas to the tropical belt. INtegrated Approach TO secure water QUALity by exploiting Sustainable processes" / <i>No. 2 positions reserved to students selected within the Programme : "101119555-IN2AQUAS-HORIZON–MSCA –2022-DN-JD Human footprint on water from remote cold areas to the tropical belt. INtegrated Approach TO secure water QUALity by exploiting Sustainable processes"</i> N. 2 posti riservati a studenti selezionati nell'ambito di specifici programmi di mobilità internazionale o banditi nell'ambito di accordi specifici a cui l'Università di Torino partecipa: EU MSCA DN - DEMO project "Discovery of efficient Enzyme-like Metal Organic frameworks to activate biomethane at low temperature. DEMO" / <i>No. 2 positions reserved to students selected within the Programme : EU MSCA DN - DEMO project "Discovery of efficient Enzyme-like Metal Organic frameworks to activate biomethane at low temperature. DEMO"</i>	

I documenti richiesti possono essere prodotti in inglese o italiano/
The required documents can be provided in English or Italian
MODALITÀ' DI AMMISSIONE

⁴ Eventuali borse aggiuntive e contratti di Apprendistato di Alta Formazione e Ricerca (Art. 45 D.lgs 81/2015), finanziati in tempi successivi alla pubblicazione del presente bando, saranno resi noti mediante pubblicazione sul [sito della Scuola di Dottorato](#), entro la data di scadenza del bando/Any additional scholarships and apprenticeship contracts (Legislative Decree no. 81/2015 art.45), which may become available after the publication of this Call, will be announced on the [Doctoral School website](#) until the Call's deadline.

<i>(titoli incluso progetto di ricerca + colloquio) /</i> ADMISSION PROCEDURE <i>(qualifications, including research project + interview)</i>		
	Punteggio massimo / Score max	Informazioni/ Documentazione per la candidatura Information/ Application documents
TITOLI / QUALIFICATIONS	40	
CV	15	CV redatto come da modello (allegato 2) / <i>CV as per template (annex 2)</i> Incluse le pubblicazioni da caricare su piattaforma domanda (massimo 2) / <i>Including publications to be uploaded on application platform (max 2)</i> Note: Verrà valutata la pertinenza dei titoli della Laurea Triennale (BSc) e della laurea Magistrale o a ciclo unico (MSc) conseguiti dal candidato rispetto ad uno dei settori scientifico-disciplinari del dottorato e l'equivalenza della votazione del BSc e del MSc o degli esami sostenuti nel caso di iscrizione sotto condizione. Verranno anche valutati altri titoli non elencati sopra purché pertinenti ad uno dei settori scientifico-disciplinari del dottorato e a condizione del riconosciuto valore scientifico. Non verrà valutato alcun titolo esclusivamente professionale o tirocinio formativo ad esclusivi fini di attività professionale. Le pubblicazioni saranno valutate solo se pertinenti ad uno dei settori scientifico-disciplinari del dottorato e a condizione del riconosciuto valore scientifico. Non verranno valutati lavori "in corso di pubblicazione", né la tesi di laurea (se non pubblicata) né altri elaborati di cui non consti la pubblicazione. / Notes: <i>The relevance of the BSc and MSc qualifications obtained by the candidate with respect to one of the scientific-disciplinary sectors of the doctorate will be assessed and the equivalence of the BSc and MSc</i> 3/12 <i>marks or exams taken in the case of enrollment under conditions.</i>

		<i>Other qualifications (not listed above) relevant to one of the scientific-disciplinary sectors and with recognized scientific value will be also evaluated.</i> <i>Any strictly professional qualification or traineeship will not be evaluated.</i> <i>Publications will be assessed only if relevant to the programme and if their scientific dimension is well recognised; yet-to-be-published papers, non-published thesis or any other kind of non-published work will not be evaluated.</i>
Progetto di Ricerca / <i>Research Project</i>	25	Il Progetto di Ricerca deve essere scelto tra quelli proposti nella lista / <i>The research project must be selected from the list</i> Il Progetto di ricerca (max. 2 pagine, inclusa bibliografia), elaborato dal candidato/dalla candidata in lingua inglese, deve sviluppare i seguenti punti: a) stato dell'arte della tematica scelta; b) obiettivi del progetto; c) articolazione nei tre anni. / <i>The research project (max. 2 pages, including bibliography), prepared by the candidate in English by choosing a title among those indicated below, must include the following points:</i> <i>a) state of the art;</i> <i>b) objectives of the project;</i> <i>c) how the project will be developed over the three years.</i>
Soglia minima per l'accesso al colloquio/ <i>Threshold to be admitted to the interview</i>	25	

COLLOQUIO / INTERVIEW	60	Il colloquio verterà sugli argomenti del progetto di ricerca / <i>The interview will focus on the research project</i> Per i candidati/le candidate ammessi/e alla fase orale, il Colloquio verterà su: - presentazione e discussione del progetto di ricerca proposto; - argomento della tesi magistrale; - temi di cultura generale relativi alla Chimica e alla Scienza dei Materiali. In particolare verranno presi in considerazione: il grado di conoscenza della materia e la capacità di sintesi della stessa; la conoscenza del tema oggetto del progetto di ricerca; l'originalità della proposta di svolgimento del progetto di ricerca, anche in ragione della capacità di evidenziare profili interdisciplinari. La conoscenza della lingua inglese (scientifico) è obbligatoria e verrà verificata durante il colloquio che sarà tenuto, almeno in parte, in lingua inglese. / <i>To those admitted to the oral exam, the interview will cover the presentation and the defense of the research project, the discussion of the master thesis as well as general knowledge of chemistry and of materials science.</i> <i>The Board will focus on: level of knowledge of the subject and communicating skills related to it; level of knowledge of the subject of the research project; originality and interdisciplinarity of the research proposal.</i>
Soglia minima per il superamento del colloquio / <i>Threshold to pass the interview</i>	40	

Titoli dei progetti di ricerca abbinati a borse: D.M. 117 (M4C2 I. 3.3)
Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche e dei Materiali

Research Topics bound to scholarships: D.M. 117 (M4C2 I. 3.3)
PhD Programme in Chemical and Materials Sciences

Per maggiori informazioni, contattare il referente scientifico / *For any further information concerning the research topics, please, contact the scientific director*

Progetto n. 1 / Project n. 1	
Titolo Progetto/ Research Topic	Polimorfismo in farmaci generici / Polymorphism in generic drugs
Referente scientifico / Scientific Director	Michele Chierotti
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	La proposta progettuale si inserisce nella tematica del Crystal Engineering e nella possibilità di creare nuovi Polimorfi, Co-cristalli e Sali di Farmaci Generici al fine di migliorare le proprietà chimico-fisiche e farmaceutiche dei farmaci in oggetto. / The project is focused on the use of Crystal Engineering for the synthesis and characterization of novel Polymorphs, Co-crystals, and Salts of generic drugs in order to improve their physico-chemical and pharmaceutical properties

Progetto n. 2 / Project n. 2	
Titolo Progetto/ Research Topic	Quantificazione di fasi amorfe e cristalline in principi attivi per uso farmaceutico / <i>Quantification of amorphous and crystalline phases in active pharmaceutical ingredients</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Gobetto Roberto
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	Il progetto di dottorato innovativo si propone di trovare delle modalità di indagine e quantificazione di fasi amorfe e fasi cristalline in ambito farmaceutico mediante tecniche di caratterizzazione NMR stato solido e

	l'utilizzo di tecniche spettroscopiche e di diffrazione complementari. Sarà anche considerata la possibilità di controllare con approcci complementari granulometria e distribuzione relativa degli API per migliorarne l'efficacia farmaceutica. / <i>The project of the Doctorate is focused on the study and quantification of amorphous and crystalline phases of active pharmaceutical ingredients by solid-state NMR and complementary spectroscopic and diffractometric techniques. It will be considered also the possibility of checking with complementary approaches the particle size and the relative dispersion distribution of the API in order to improve the pharmaceutical efficacy.</i>
--	---

Progetto n. 3 / Project n. 3	
Titolo Progetto/ Research Topic	Sistemi di microcampionamento Dried Blood Spots per analisi di interesse clinico e forense / <i>Dried Blood Spots microsampling systems for analysis of clinical and forensic interest</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Salomone Alberto
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	Il Dried Blood Spots (DBS) è una tecnica di microcampionamento basata sulla raccolta di gocce di sangue capillare su carta da filtro. Il DBS offre vantaggi come semplicità, velocità, resistenza alle manipolazioni e maggiore stabilità. La raccolta del sangue capillare è minimamente invasiva e il volume di sangue raccolto è ridotto, migliorando così la vita delle persone che si sottopongono alle analisi. Questo progetto si concentrerà sullo sviluppo di metodi innovativi basati sul campionamento DBS e su analisi con strumentazione UHPLC-MS/MS e UHPLC-HRMS. Le moderne apparecchiature analitiche hanno prestazioni avanzate in termini di sensibilità e specificità, consentendo il rilevamento di centinaia di composti in un'unica analisi, anche partendo da un piccolo volume di sangue. L'analisi di composti strutturalmente diversi, con adeguati limiti di rilevabilità e quantificazione, si presta a diverse possibili applicazioni. Saranno sviluppati e validati metodi targeted e untargeted. / <i>Dried blood spot (DBS) is a microsampling technique based on a capillary blood drop collection on a filter paper. DBS provides advantages such as simplicity, speed, resistance to manipulations and enhanced stability. The collection of capillary blood is minimally invasive, and the volume of blood collected is low, thus improving the lives of the tested individuals.</i> <i>This project will focus on innovative method development based on DBS sampling and UHPLC-MS/MS and UHPLC-HRMS analyses. Modern analytical equipment has advanced performances in terms of sensitivity and specificity, allowing the detection of hundreds of compounds in one single run</i>

	from a small volume of blood. The analysis of structurally different compounds with adequate levels of detection and quantification will open the way to different possible applications. Targeted and untargeted methods will be developed and validated.
--	--

Progetto n. 4 / Project n. 4	
Titolo Progetto/ Research Topic	Sviluppo di catalizzatori eterogenei nanostrutturati per la conversione di idrocarburi derivanti da riciclo, in molecole a più alto valore aggiunto / <i>Development of nanostructured heterogeneous catalysts for the conversion of hydrocarbons derived from recycling, into higher value-added molecules</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Bordiga Silvia
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	Il progetto prevede di sviluppare catalizzatori eterogenei per la conversione di molecole/macromolecole di scarto in prodotti a maggiore valore aggiunto che possano trovare impiego come combustibili o come molecole per la chimica di base. Nella selezione dei catalizzatori ci si rivolgerà preferibilmente a materie prime non rare e si farà particolare attenzione a selezionare condizioni di reazione non estreme per quanto concerne temperature e pressioni di esercizio delle reazioni prese in esame. Le attività riguarderanno la messa a punto del catalizzatore, la sua formatura, la caratterizzazione con metodi spettroscopici condotti in condizioni controllate ed il testing anche in condizioni di impianto dimostratore. I primi substrati considerati saranno di natura liquida ma, in un secondo tempo si prenderà in considerazione anche la conversione di molecole in fase gas, eventualmente anche la molecola di metano. / <i>The project plans to develop heterogeneous catalysts for the conversion of waste molecules/macromolecules into products with greater added value that can be used as fuels or as molecules for basic chemistry. In the selection of the catalysts we will preferably turn to raw materials that are not rare and particular attention will be paid to selecting non-extreme reaction conditions as regards the operating temperatures and pressures of the reactions under examination. The activities will concern the development of the catalyst, its forming, the characterization with spectroscopic methods carried out in controlled conditions and the testing also in conditions of a demonstrator reactor. At the beginning of the project, we will consider liquid substrates but, in a second step, the conversion of gaseous molecules (among which methane) will also be taken into consideration.</i>

Progetto n. 21 / Project n. 21	
Titolo Progetto/ Research Topic	Sistemi compositi di idruri metallici e polimeri per lo stoccaggio di idrogeno / <i>Composites of metal hydrides with polymers for hydrogen storage</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Baricco Marcello
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	Lo stoccaggio di idrogeno è una sfida fondamentale per l'implementazione su larga scala delle tecnologie basate sul suo uso. Gli idruri metallici rappresentano una classe di materiali promettenti per lo stoccaggio sicuro ed efficiente di idrogeno. Tuttavia, i limiti degli idruri metallici possono essere superati attraverso l'utilizzo di sistemi compositi, combinando questi con polimeri adatti. Questo progetto di ricerca mira a sviluppare e caratterizzare sistemi compositi di idruri metallici e polimeri per il miglioramento dello stoccaggio di idrogeno. Si richiede di valutare la disponibilità di idruri metallici e polimeri adatti per la formazione dei sistemi compositi per lo stoccaggio di idrogeno, di caratterizzare le proprietà di stoccaggio di idrogeno dei compositi sviluppati, sviluppare e ottimizzare i processi di sintesi per la preparazione dei sistemi compositi, valutare la stabilità dei sistemi compositi nel corso di cicli ripetuti di assorbimento e desorbimento di idrogeno. In conclusione, si richiede di trarre conclusioni sulle prestazioni dei sistemi compositi di idruri metallici e polimeri per lo stoccaggio di idrogeno e suggerire possibili applicazioni future./ <i>Hydrogen storage is a fundamental challenge for the widespread implementation of hydrogen-based technologies. Metal hydrides represent a promising class of materials for safe and efficient hydrogen storage. However, the limitations of metal hydrides can be overcome by utilizing composite systems that combine them with suitable polymers. This research project aims to develop and characterize composite systems of metal hydrides and polymers for enhanced hydrogen storage. The objectives include evaluating the availability of suitable metal hydrides and polymers for the formation of composite systems, characterizing the hydrogen storage properties of the developed composites, optimizing the synthesis processes for composite preparation, and assessing the stability of composite systems during repeated cycles of hydrogen absorption and desorption. In conclusion, the project seeks to draw conclusions regarding the performance of composite systems of metal hydrides and polymers for hydrogen storage and suggest potential future applications.</i>

Progetto n. 22 / Project n. 22	
Titolo Progetto/ Research Topic	Studio dell'introduzione di nanomateriali in strutture metalliche attraverso tecnologie avanzate di giunzione per fini protettivi e strutturali / <i>Study of the Introduction of Nanomaterials into Metal Structures through Advanced Joining Technologies for Protective and Structural Purposes.</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Baricco Marcello
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	L'introduzione di nanomateriali in strutture metalliche attraverso tecnologie avanzate di giunzione può generare effetti positivi sulla resistenza meccanica. La ricerca ha lo scopo di studiare diversi tipi di nanomateriali disponibili e le loro proprietà protettive e strutturali. In particolare, si intende esaminare le modifiche della microstruttura dopo l'introduzione dei nanomateriali e valutarne l'influenza sulle proprietà finali. Inoltre, si intende valutare la resistenza alla corrosione delle strutture metalliche dopo l'introduzione dei nanomateriali e determinare la loro efficacia come strati protettivi. Infine, si richiede di trarre conclusioni sulla fattibilità e l'efficacia dell'utilizzo di nanomateriali integrati nelle strutture metalliche e suggerire alcune linee guida per l'applicazione pratica./ <i>The introduction of nanomaterials into metal structures through advanced joining technologies can have positive effects on mechanical strength. This research aims to study various types of available nanomaterials and their protective and structural properties. Specifically, it seeks to examine the changes in microstructure after the introduction of nanomaterials and evaluate their influence on the final properties. Additionally, it intends to assess the corrosion resistance of metal structures after the introduction of nanomaterials and determine their effectiveness as protective coatings. Finally, it requires drawing conclusions regarding the feasibility and effectiveness of using integrated nanomaterials in metal structures and suggesting practical application guidelines.</i>

Progetto n. 23 / Project n. 23	
Titolo Progetto/ Research Topic	<i>Materiali per la cattura della CO₂ dall'aria / Materials for CO₂ capture from air</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Bordiga Silvia

Lingua progetto/ Project language	Inglese / English
Descrizione sintetica / Abstract	<i>L'obiettivo principale della ricerca sarà lo sviluppo di nuovi materiali adsorbenti per la cattura di CO₂ dall'aria (DAC direct Air Capture). Per superare il limite derivante dall'estrema diluizione della CO₂ nell'aria (350 volte inferiore a quella riscontrata in una emissione da una centrale a carbone), il progetto svilupperà materiali chemi-assorbenti a base di ammine e/o liquidi ionici supportati in materiali ad alta area superficiale, robusti ed economici (ad es. PAF (poly-aromatic-frameworks) e MOF (metal organic framework). Il lavoro, sviluppato in collaborazione con UniMib e STELLANTIS, prenderà in considerazione: i) la sintesi degli adsorbenti; ii) i test delle proprietà di adsorbimento in termini di capacità di assorbimento di CO₂, selettività, ciclabilità, stabilità; iii) la caratterizzazione per identificare il meccanismo di adsorbimento. Saranno ampiamente applicate le spettroscopie in atmosfera controllata (in situ e operando) e approcci volumetrici. La modellazione fornirà un aiuto nell'interpretazione dei dati sperimentali. La selezione dei materiali target sarà effettuata considerando anche gli aspetti legati alla necessità di produzioni su larga scala, necessarie per lo sviluppo di un'applicazione tecnologica./</i> <i>The main objective of the research will be the development of new solid adsorbents for CO₂ capture from air (DAC direct Air Capture). To overcome the extreme dilution of CO₂ in air (350 times lower than that found in a typical coal-based flue gas) the project will develop chemisorbent materials based on amine and or ionic liquid highly distributed in robust and cheap high surface area materials (e.g. PAFs (poly-aromatic-frameworks) and MOFs (metal organic framework). The work, developed in collaboration with UniMib and STELLANTIS will consider: i) synthesis of the adsorbents; ii) testing of the adsorption properties in terms of CO₂ uptake, selectivity, cyclability, stability; iii) characterization of the adsorbents to identify the adsorption mechanism. Spectroscopies in controlled atmosphere (in situ and operando) and volumetric approaches will be extensively applied. Molecular modelling will provide help in the experimental data interpretation. The selection of the target materials will be done considering also the aspects related to the need of large-scale productions required for the development of a technological application.</i>

Progetto n. 24 / Project n. 24	
Titolo Progetto/ Research Topic	Elettroliti inorganici per batterie al litio a stato solido / <i>Inorganic electrolytes for solid state Li batteries</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Mauro Sgroi

Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	Gli idruri metallici complessi sono una classe di materiali con proprietà interessanti per la mobilità elettrica. Infatti, includono molti composti adatti per essere utilizzati come elettroliti a stato solido, mostrando un'elevata conducibilità ionica. I boroidruri metallici hanno una chimica estremamente ricca e una flessibilità strutturale affascinante. Infatti, le loro caratteristiche strutturali offrono una vasta gamma di proprietà chimico-fisiche. I metodi di sintesi includono l'approccio per via umida e la meccano-chimica, che possono essere facilmente scalate a livello industriale. La modifica con opportuni sostituenti (ad esempio, sostituzione cationica e/o anionica, l'aggiunta di ossidi, solfuri e alogenuri) può contribuire a migliorare la mobilità ionica, aumentando la conducibilità e la finestra di stabilità elettrochimica. L'obiettivo principale del programma di dottorato sarà la modifica dei boroidruri metallici mediante processi meccano-chimici con l'aggiunta di additivi per migliorare la conducibilità degli ioni di litio. Gli additivi principali selezionati saranno ossidi conduttori di litio (garnet, composti di tipo NASICON, perovskiti), solfuri e alogenuri./ <i>Complex Hydrides are a class of materials with interesting properties for e-mobility. Infact, they include many compounds suitable to be used as solid-state electrolytes, showing super-ionic ion conductivity. Metal Borohydrides have extremely rich compositional chemistry and fascinating structural flexibility. In fact, their structural features provide a wide range of chemical-physical properties. Synthesis routes include wet chemistry and mechano-chemistry, that can be easily scaled up. Modification with suitable substituents (i.e. cationic and/or anionic substitution, composites with oxides, sulfides and halides) can help to increase the atomic mobility improving the ionic conductivity and the electrochemical stability window. The main objective of the PhD program will be the modification of metal borohydrides through mechanical-chemical processes with additives to improve the Li-ion conductivity. The main selected additives will be Li conducting oxides (garnets, NASICON type compounds, perovskites), sulfides and halides.</i>

Progetto n. 25 / Project n. 25	
Titolo Progetto/ Research Topic	Materiali per supercapacitori asimmetrici / <i>Materials for asymmetric supercapacitors</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Mauro Sgroi
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>

Descrizione sintetica / Abstract	I supercapacitori sono un tipo di condensatori capaci di immagazzinare una grande quantità di energia, tipicamente da 10 a 100 volte più energia per unità di massa o volume rispetto ai condensatori elettrolitici. I supercapacitori sono dispositivi di stoccaggio elettrochimico composti da due elettrodi a contatto con un elettrolita liquido. A seconda del tipo di meccanismo di stoccaggio della carica, i supercapacitori possono essere classificati in condensatori a doppio strato elettrico (EDLC) e pseudocapacitori, in cui i materiali degli elettrodi mostrano comportamenti di stoccaggio dell'energia simili a quelli delle batterie. Un supercondensatore asimmetrico è composto da due diversi tipi di elettrodi, uno costituito da un materiale a doppio strato elettrico (EDL) e l'altro costituito da un materiale pseudocapacitivo. La differenza principale rispetto alle batterie è che i supercapacitori possono fornire una potenza specifica maggiore ma un'energia specifica inferiore. Le applicazioni tipiche includono i monopattini elettrici e l'elettronica indossabile per lo sport e il tempo libero. Il progetto di dottorato svilupperà nuovi materiali e processi per supercapacitori asimmetrici, concentrandosi in particolare sul miglioramento della densità energetica, la produzione sostenibile dei componenti chiave e la riduzione o l'eliminazione dell'uso di materiali critici (CRMs). / <i>Supercapacitors are a type of capacitor capable of storing a large amount of energy, typically 10 to 100 times more energy per unit mass or volume compared to electrolytic capacitors. Supercapacitors are electrochemical storage devices consisting of two electrodes in contact with a liquid electrolyte. Depending on the type of charge storage mechanism, supercapacitors can be classified into electric double-layer capacitors (EDLCs) and pseudocapacitors, in which the electrode materials exhibit battery-type energy storage behavior.</i> <i>An asymmetric supercapacitor consists of two different types of electrodes, with one composed of electrochemical double-layer (EDL) material and the other composed of pseudocapacitive material. The key difference compared to batteries is that supercapacitors can deliver higher specific power but lower specific energy. Typical applications include electric scooters and wearable consumer electronics for sports and leisure. The PhD project will address the challenges associated with asymmetric supercapacitor devices by developing novel materials and processes, particularly focusing on improving energy density, sustainable production of key components, and minimizing or eliminating the use of critical raw materials (CRMs).</i>
--	---

Titoli dei progetti di ricerca abbinati a borse: D.M. 118 (M4C1 I. 4.1)
Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche e dei Materiali

Research Topics bound to scholarships: D.M. 118 (M4C1 I. 4.1)
PhD Programme in Chemical and Materials Sciences

Per maggiori informazioni, contattare il referente scientifico / For any further information concerning examinations, please, contact the scientific director

Progetto n. 5 / Project n. 5	
Titolo Progetto/ Research Topic	Applicazioni chemiometriche e di machine learning per la chimica clinica e la chimica forense / <i>Chemometric and machine learning applications for clinical chemistry and forensic chemistry</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Alladio Eugenio
Lingua progetto/ Project language	Inglese / <i>English</i>
Descrizione sintetica / Abstract	Il progetto di Dottorato di Ricerca proposto riguarda l'imaging iperspettrale in ambito chimico clinico e chimico forense per la costruzione di approcci di Machine Learning e algoritmi open-source (in accordo ai principi di "Open science" e "FAIR Data") per l'elaborazione e l'analisi di dati di imaging iperspettrale (vicino infrarosso NIR, UV-Visibile e fluorescenza raggi X). L'obiettivo del progetto è quello di riconoscere, individuare e classificare tracce biologiche di interesse forense, insieme alla valutazione della loro natura e posizione su un reperto o su una scena del crimine, così come costruire modelli di classificazione per la diagnosi e la medicina personalizzata in seguito all'analisi di matrici biologiche quali, ad esempio, urina e sangue. <i>The proposed Ph.D. research project concerns hyperspectral imaging in the field of clinical chemistry and forensic chemistry for the development of machine learning approaches and open-source algorithms (in accordance with the principles of "Open science"; and "FAIR Data") for the processing and analysis of hyperspectral imaging data (near-infrared NIR, UV-visible, and X-ray fluorescence). The objective of the project is to recognize, identify, and classify biological traces of forensic interest, along with evaluating their nature and location on an artifact or at a crime scene, as well as constructing classification models for diagnosis and personalized medicine following the analysis of biological matrices such as urine and blood, for instance.</i>

**Titoli dei progetti di ricerca abbinati a borse: PNRR
Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche e dei Materiali**

***Research Topics bound to scholarships: NPRR
PhD Programme in Chemical and Materials Sciences***

Progetto n. 6 / Project n. 6

Titolo Progetto / Research Topic	Reazioni organiche in solventi verdi. Studio teorico dei meccanismi di reazione e dell'effetto dei solventi / Organic reactions in green solvents. Theoretical study of reaction mechanisms and solvents effect
Referente scientifico / Scientific Director	Maranzana Andrea
Lingua progetto/ Project language	Inglese / English
Codice CUP / Project Code	D13C22001340001

Progetto n. 7 / Project n. 7

Titolo Progetto / Research Topic	Sviluppo del Software CRYSTAL per Calcolo ad Alte Prestazioni / <i>Development of the CRYSTAL Software for High Performance Computing</i>
Referente scientifico / Scientific Director	Erba Alessandro
Lingua progetto/ Project language	Inglese / English
Codice CUP / Project Code	D13C22001340001

**Titoli dei progetti di ricerca abbinati a borse ordinarie
Dottorato di Ricerca in**

***Research Topics bound to standard scholarships
PhD Programme in***

Per maggiori informazioni, contattare il referente scientifico / For any further information concerning examinations, please, contact the scientific director

Numero Titolo/ Topic number	Referente scientifico / Scientific director	Titolo del progetto / Research Topic
8	Barolo Claudia	Progettazione, sintesi e caratterizzazione di materiali organici coniugati per applicazioni in dispositivi optoelettronici e/o per la transizione energetica / <i>Design, synthesis and characterization of conjugated organic materials for optoelectronic and energy-transition related devices</i>
9	Ginepro Marco	Sviluppo di strategie di estrazione green di composti bioattivi dai rifiuti alimentari per l'applicazione, come agenti funzionali, in packaging attivi e formulazioni cosmetiche / <i>Development of green extraction strategies of bioactive compounds from food waste for application, as functional agents, in active packaging and cosmetic formulations</i>
10	Naldoni Alberto	Proprietà e reattività di fotocatalizzatori plasmonici con interfaccia ingegnerizzata / <i>Properties and reactivity of plasmonic photocatalysts with engineered interface</i>
11	Prandi Cristina	Strategie sintetiche e sostenibilità: metodologie e approcci non convenzionali per la sintesi di composti bioattivi / <i>Synthetic strategies meet sustainability: methodologies and non conventional approaches towards bioactive compounds</i>
12	Rizzi Paola	Progettazione di materiali metallici per applicazioni biocompatibili / <i>Design of metallic materials for biocompatible applications</i>
13	Signorile Matteo	Sintesi, caratterizzazione e testing di catalizzatori microporosi inorganici / <i>Synthesis, characterization and testing of microporous inorganic catalysts</i>
14	Civalleri Bartolomeo	Data-driven ottimizzazione e predizione di proprietà di adsorbimento e reattività di materiali microporosi / <i>Data-driven optimization and</i>

		prediction of adsorption properties and reactivity of microporous materials
15	Pellegrino Francesco	Machine Learning e chemiometria per modellizzare la sintesi, la tossicità e l'attività catalitica di materiali 2D morfologicamente controllati / <i>Machine Learning and Chemometric approach for modelling the synthesis, toxicity and catalytic activity of morphology-controlled 2D-materials</i>
16	Barolo Claudia Civalleri Bartolomeo	Sviluppo di metodologie avanzate sperimentali e/o teoriche per le scienze chimiche e dei materiali / <i>Development of advanced experimental and/or theoretical methodologies for chemical and materials sciences</i>
17	Prandi Cristina	Applicazioni della Flow Chemistry per la sintesi di Principi Attivi Farmaceutici API e loro intermedi / <i>Application of Flow Chemistry to the synthesis of active pharmaceutical ingredients API and their intermediates</i> (titolo di ricerca abbinato al posto riservato a dipendenti dell'impresa Procos S.p.A / <i>research project linked to the scholarship funded by Procos S.p.A.</i>)
18	Passananti Monica	Nanoplastiche nell'ambiente: metodi di analisi e reattività / <i>Nanoplastics in the environment: detection methods and reactivity</i> (titolo di ricerca abbinato a borsa di studio finanziata dal Dipartimento di Chimica su fondi provenienti da progetto europeo H2020 ERC Starting Grant "NAPUE")
19	Sgroi Mauro	Misura e simulazione della conducibilità ionica in elettroliti solidi per batterie secondarie / <i>Measurement and simulation of ionic conductivity in solid electrolytes for secondary batteries</i> (titolo di ricerca abbinato a borsa di studio finanziata da INRIM / <i>research project linked to the scholarship funded by INRIM</i>)
20	Paola Rizzi	Studio volto all'analisi del ciclo di vita delle principali tecnologie dell'idrogeno che verranno adottate per la decarbonizzazione del sistema energetico ed elettrico / <i>Study aimed at life cycle analysis of the main hydrogen technologies to be adopted for decarbonization of the power and energy system</i> (titolo di ricerca abbinato a borsa di studio finanziata da Enea / <i>research project linked to the scholarship funded by Enea</i>)
26	Federico Picollo	Sviluppo e produzione di biomateriali per il tissue mimicking e per lo studio di interazioni cellulari /

		<i>Development and production of biomaterials for tissue mimicking and for the study of cellular interactions</i> (titolo di ricerca abbinato a borsa di studio finanziata da INRIM / <i>research project linked to the scholarship funded by INRIM</i>)
--	--	--