

CORSO DI DOTTORATO IN CATALISI

Insegnamenti previsti (distinti da quelli impartiti in insegnamenti relativi ai corsi di studio di primo e secondo livello)

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
1.	<i>Data Scientist with R</i>	18	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>Data science is the practice of transforming data into knowledge, and R is one of the most popular programming language used by scientists. The course aims to provide students with: i) the skills necessary to use the R programming language, ii) the principles of statistics to analyze and transform data, and iii) the functions to create and interpret descriptive and multivariate statistics, graphic representations, and statistical models.</i>		SI	SI	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i>
2.	<i>Novel Technologies for Catalysis part 1</i>	18	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>Modern chemical production relies on the development of innovative technologies that could allow the preparation of the desired chemicals at the highest chemical and economic efficiency.</i> <i>In the first part chemistry in continuous-flow will be presented. Flow technologies have proved to be powerful synthetic tools for accessing complex molecular entities in a faster and user friendly manner. The use of flow</i>		SI	SI	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona.</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p>reactors has also proven to be very effective for the definition of protocols featuring easier purification of the pure products leading to a minimal waste production and consequently a lower cost of the synthetic process. In this course, the student will be introduced to the fundamental aspects of flow chemistry and some examples of application of this technology to relevant target will be also presented.</p>				La verifica sarà analoga per tutti.
3.	Novel Technologies for Catalysis part 2	18	<p>primo anno secondo anno terzo anno</p>	<p>Modern chemical production relies on the development of innovative technologies that could allow the preparation of the desired chemicals at the highest chemical and economic efficiency.</p> <p>In the second part of this course will be presented the use of electrochemistry, thermal induction, microwave irradiation, ultrasounds to optimize and promote the catalytic efficiency of a process and the minimization of waste when applied to the production of a target material.</p> <p>Combination of these technologies with flow chemistry will be also discussed.</p>		SI	SI	Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.
4.	Enabling Technologies for Organic Synthesis	18	<p>primo anno secondo anno terzo anno</p>	<p>The course will focus on different technologies that are of current interest for the application of catalytic</p>		SI	SI	Il corso sarà erogato in presenza presso la sede

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p><i>methodologies:</i> -Electrocatalysis; -Flow Chemistry; -Mechanochemistry; -Photochemistry; -Sonochemistry; IN particular these topics will be presented in relation to their applications to organic synthesis.</p>				<p><i>amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>
5.	<p><i>Catalisi Sostenibile per la Sintesi Stereoselettiva di Intermedi e Composti Eterociclici</i></p>	8	<p><i>primo anno secondo anno terzo anno</i></p>	<p><i>The teaching lessons are about the catalytic systems useful to obtain important functionalizations of common starting organic reagents to optically active intermediates/building blocks and one-pot reactions leading to more complex heterocyclic compounds of biological interest. Organic-, metallic and photocatalytic systems will be illustrated in concert, to show their synergy in asymmetric synthesis. The reactions involved in the teaching lessons are prevalently those studied during the previous courses of organic chemistry offered in the bachelor and master degrees. Sustainable features, step-atom-, pot-economies as well as the</i></p>		SI	SI	<p><i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<i>mechanistic issues involved in the processes will be highlighted.</i>				
6.	<i>Supramolecolare: Dal Riconoscimento Molecolare alla Catalisi Supramolecolare</i>	8	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>Overview of weak supramolecular interactions involved in catalytic processes such as hydrogen and halogen bonding, electrostatic interactions, CH-pi and pi-pi interactions (1h). Supramolecular host structures as nano-reactors: the confinement effects in supramolecular catalysis (2h). Supramolecular catalysis in water exploiting the hydrophobic effect (2h). Interplay of photocatalysis and supramolecular chemistry (2h)</i>		SI	SI	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i>
7.	<i>Metal-, organo- and photocatalysis: Recent Developments and Synthetic Applications</i>	24	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>The course will focus on the most recent developments of catalysis spanning from stereoselective metal- and organocatalysis to photosynthetic catalysis. Particular attentions will be paid to the different activation modes and reaction mechanisms involved in the diverse catalytic transformations. A green chemistry perspective will be also presented, with a special attention to the conversion of renewable feedstocks. The potential future developments of the</i>		SI	SI	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<i>different fields will be discussed.</i>				<i>sarà analoga per tutti.</i>
8.	<i>Asymmetric organocatalysis</i>	6	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>Introduction to asymmetric organocatalysis from the beginnings to the challenges for the development of various types of activation. The main types will be covered of activation (eg: aminocatalysis, acids e Bronsted bases, Lewis acids and bases) and the their impact on sustainable chemistry. The challenge of a research field that has seen a "Gold Rush" will also be useful for discuss how to carry out the research, with potential success, in a field highly competitive for PhD students and ESRs.</i>		<i>SI</i>	<i>SI</i>	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i>
9.	<i>Sustainable development of industrial processes in pharma</i>	6	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>A selection of industrial processes for Active Pharmaceutical Ingredients (API) will come treated starting from the development in research laboratory to arrive at a productive process. It will be initially introduced intellectual property and the drug discovery process, for then analyze processes. We will see how initially in a medchem laboratory here is little attention to sustainability and large-scale synthesis and is only when a molecule is potentially interesting that the research focuses on all those aspects which</i>		<i>SI</i>	<i>SI</i>	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<i>make it possible to carry a process on an industrial scale.</i>				<i>analoga per tutti.</i>
10.	<i>Organometallic chemistry and catalysis</i>	18	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>Ligands substitution on metal complexes, oxidative addition and reductive elimination, sigma-ligands metathesis, 1,1- and 1,2-migratory insertion, beta alkyl elimination, beta hydride elimination and cyclometallation, nucleophilic displacement. Basic concepts of catalysis. Olefins hydrogenation, asymmetric hydrogenation with the use of chiral or prochiral phosphines, hydrogen transfer on unsaturated substrates such as carbonyl compounds, hydrocyanation, hydroformilation, methanol carbonylation, alkenes oxidation, asymmetric epoxidation, homogeneous polymerization, alkenes metathesis. Transition-metal catalysts in C-C bond formation. Organocopper reagents and cross-coupling reaction palladium catalyzed. Lewis acid catalyst in stereoselective organic synthesis. Hybrid catalysis, tethered catalysts, biphasic catalysis, hydrophilic ligands, ionic liquids, fluorinated solvents.</i>		<i>SI</i>	<i>SI</i>	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare e di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i>
11.	<i>Basic principles of environmental catalytic processes</i>	6	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>The course will introduce the PhD student to the fundamentals of environmental catalytic processes, with special attention</i>		<i>SI</i>	<i>SI</i>	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p><i>to the basic principles of heterogeneous catalysis and their application to emissions abatement and sustainable energy production. The basics of environmental catalysis will be presented, and focus will be given to material properties and their characterization using the most applied techniques, as well as to basic reactions and applications, including mechanisms of catalysts deactivation. At the end of the course, the student will acquire the knowledge to recognize selectively the main parameters affecting a catalytic process and the capability to distinguish critically their relative importance. The course will provide the basic tools to discuss and deal with the main environmental catalytic processes.</i></p>				<p><i>attiva ma anche su piattaforma a on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>
1 2.	<p><i>MODern catalytic approaches</i></p>	18	<p><i>primo anno secondo anno terzo anno</i></p>	<p><i>Module 1 (6 ore) "Catalysts for the electrification of the chemical industry" Catalytic routes to decarbonize the chemical industry will be explained. The challenges in the development of catalysts for power-to-heat processes will be studied (e.g. composition and shaping). Module 2 (6 ore) "Toolbox approach for the optimisation of supported</i></p>		SI	SI	<p><i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma a on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p><i>nanoparticle catalysts and catalytic applications”</i> <i>Different strategies will be introduced for the design of size and shape supported nanoparticles for a number of sustainable chemical processes. Examples of how to use specific characterisation techniques for elucidating structure-activity relationships will be presented.”</i> Module 3 (6 ore) <i>“Methodologies for modelling (photo)chemical processes” .</i> <i>During these lectures, the theoretical framework related to the simulation of thermal and photoinduced reactions in molecular systems will be illustrated. This will span concepts such as potential energy surfaces of electronic states, minima and transition states, reaction paths and reaction coordinates, deactivation events in photoexcited molecules and reaction branching in photochemical processes, environment effects. The arsenal of computational tools to track the reaction coordinate of (photo)chemical processes and perform experiments on-silico will be also shown.</i></p>				<p><i>hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>
1 3.	<p><i>Enabling technologies in green chemical</i></p>	12	<p><i>primo anno secondo anno</i></p>	<p><i>The demand for process intensification in the chemical industry has found</i></p>		SI	SI	<p><i>Il corso sarà erogato in presenza</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
	<i>synthesis and processing</i>		<i>terzo anno</i>	<i>several innovative solutions by means of enabling technologies to improve heat and mass transfer. A number of non-conventional energy sources such as acoustic and hydrodynamic cavitation (sonochemistry), dielectric (microwaves) and ohmic heating, ball mills and reactive extruders (mechanochemistry), micro- and mesochannel reactors (flow chemistry), atmospheric plasma, pulsed electric fields, photochemistry, infrared, and others. Even more effective are some hybrid technologies, where the combination of different techniques generates synergistic effects. In addition to synthetic and selective extraction processes, downstream applications and purification processes are reported with case studies.</i>				<i>presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i>
1 4.	SYNTHESIS TECHNIQUES FOR FUNCTIONAL SURFACES AND NANOSTRUCTURES	30	<i>primo anno secondo anno terzo anno</i>	<i>The aim of the course is to provide a basic description of five surface analysis techniques, together with some of their applications: secondary ion mass spectrometry (SIMS), Rutherford backscatter spectrometry (RBS), Particle-induced X-ray (PIXE), X-ray induced photoelectron spectroscopy (XPS) or electron spectroscopy for chemical analysis (ESCA), Auger electron spectroscopy (AES).</i>		SI	SI	<i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p><i>The physical and chemical analysis of surfaces is essential for understanding how materials interact with their surroundings. Surface analysis techniques provide the tools to explore the physics and chemistry of the surface of solid materials. The main objective of the course is to induce students to correctly choose a surface characterization technique based on the scientific questions they have to answer. The specific objective of the second part of the course is the correct application of the techniques learned in the first part to a specific sector of nanotechnology, such as energy conversion. Students should be able to correlate the structural, morphological and compositional properties with the functionalities offered by different structures. Students will learn the basic principles of some surface analysis techniques, the physical and chemical information that these techniques can provide, the necessary instrumentation. The course will be illustrated by various examples of application of these surface analysis techniques to solid materials of different nature: glasses, metals, ceramics, nanostructured materials, etc.</i></p>				<p><i>hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
1 5.	GREEN SYNTHETIC APPROACHES AND SUSTAINABLE PROCESSES	30	primo anno secondo anno terzo anno	<p>The teaching will allow the student to deepen, both from a theoretical and an experimental point of view, complex scientific topics in the field of chemistry and materials. The objectives of the course are: a) to provide advanced notions of sustainable chemistry, concerning in particular the use of reagents and/or solvents of renewable origin, the development of catalytic processes on starting materials of renewable origin for the preparation of new molecules and/or materials; b) development and possible applications of environmentally friendly chemical processes ("zero impact" or "carbon neutral") such as photo- and electrochemical organic syntheses; c) develop the skills to critically, qualitatively and quantitatively evaluate the sustainability of a chemical process. Expected learning outcomes</p> <p>At the end of the course, students will be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - understand and identify the main characteristics of sustainable chemistry procedures already reported in the literature, - critically analyze the available literature on sustainable chemistry; - carry out qualitative and/or quantitative 		SI	SI	Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p><i>assessments of the sustainability of a given chemical process;</i></p> <p><i>- apply the notions acquired to research topics of interest within their PhD programme.</i></p>				
1 6.	NANOSCALE MATERIALS FOR ENVIRONMENTAL AND BIOMEDICAL APPLICATIONS	30	<p><i>primo anno</i></p> <p><i>secondo anno</i></p> <p><i>terzo anno</i></p>	<p><i>This course provides students with a general overview of the application of nanomaterials for environmental and biomedical purposes, with particular attention to the related state of the art.</i></p> <p><i>Expected learning outcomes</i></p> <p><i>At the end of the course, students are able to critically analyze the literature on nanomaterials for environmental and biomedical applications and to understand their current challenges. Additionally, students are able to understand the positive and negative impacts of nanomaterials on the environment and human health.</i></p> <p><i>Prerequisites</i></p> <p><i>Specialist level knowledge of Chemistry, Physics and Materials Science.</i></p> <p><i>Contents</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>- Water treatment</i> <i>- Nano-absorbents</i> <i>- Advanced oxidation processes for water treatment</i> <i>- Photocatalysis</i> <i>- Nanomaterials for agriculture</i> <i>- Nanopollution</i> <i>- Air purification</i> <i>- Nanotoxicity</i> <i>- Drug delivery with</i> 		SI	SI	<p><i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p><i>nanomaterials</i> - <i>Bioimaging with nanomaterials</i> - <i>Nanobiosensors</i></p>				
17	<p>MOLECULAR ELECTROCHEMISTRY WITH ELEMENTS OF BIOMOLECULAR ELECTROCHEMISTRY</p>	30	<p><i>primo anno</i> <i>secondo anno</i> <i>terzo anno</i></p>	<p><i>The course aims at providing students an overview of the fundamentals of electrode kinetics and thermodynamics in electrochemical systems. Specific applications will be also provided, such as electrogenerated chemiluminescence, electrochemical probe microscopy, electrocatalysis and biosensing development. Content: General properties of electrochemical systems. Electrode-solution interphases. Theory of the electric double layer. Mass transport. Fundamentals of electrode kinetics and thermodynamics. Electron transfer theory. Main experimental methodologies aimed at investigating the electrode kinetics: voltammetry, chronoamperometry. Dissociative electron transfer in molecular model systems. Redox catalysis. Electrogenerated chemiluminescence. Electrochemistry as a powerful tool to develop new technologies for a sustainable and renewable energy production/storage/conversion, and a cleaner environment. Advanced electrochemical techniques and</i></p>		SI	SI	<p><i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale	Note
				<p><i>instruments based on scanning probe microscopy: scanning electrochemical microscopy (SECM), also coupled with atomic force microscopy (AFM-SECM).</i></p> <p><i>Development of electrochemical-based biosensing platforms: ELISA-derived and aptamer/DNA-based technologies, field-effect transistors (FETs).</i></p> <p><i>Coupling techniques: can optical and electrochemical systems work together, perhaps simultaneously? Conclusions and perspectives: what next?</i></p>				
1 8.	<i>Principles of Circular economy</i>	8	<p><i>primo anno</i> <i>secondo anno</i> <i>terzo anno</i> <i>quarto anno</i></p>	<p><i>The term "sustainability" has now entered common use and represents the keystone for the ecological and energy transition. The course aims to present the chemical foundations underlying the heterogeneous catalytic processes of reductive depolymerization of the main fractions of lignocellulosic biomass (cellulose, hemicellulose, lignin and their relative model molecules) as well as of plastic material (polyolefins) in chemical products with high value added.</i></p>		SI	SI	<p><i>Il corso sarà erogato in presenza presso la sede amministrativa ma anche su piattaforma on line per permettere la partecipazione agli studenti di altre sedi che non hanno potuto partecipare di persona. La verifica sarà analoga per tutti.</i></p>