Bando di selezione pubblica per titoli e colloquio per il conferimento di un assegno di ricerca – lettera b) di durata annuale.

Allegato A

o Titolo del progetto/Tema di ricerca in italiano:

Sviluppo e caratterizzazione di nuove rodopsine fluorescenti per l'optogenetica

o Titolo del progetto/Tema di ricerca in inglese:

Development and characterization of novel fluorescent rhodopsins for optogenetics

o Settore Scientifico Disciplinare:

CHIM/06 - CHIMICA ORGANICA

o Settore concorsuale:

03/C1 - CHIMICA ORGANICA

o Campo principale della ricerca:

Chemistry

Descrizione della ricerca in italiano:

L'assegnista sarà incaricato di sviluppare metodologie per costruire automaticamente, studiare ed utilizzare modelli QM/MM basati sul protocollo CASPT2//CASSCF/6- 31G*/Amber ed utilizzarli per studiare le proprietà spettroscopiche e fotochimiche di varie rodopsine naturali ed artificiali atte a ricercare una alta resa quantica di fluorescenza per l'optogenetica. L'assegnista dovrà consolidare una nuova linea di ricerca atta a generalizzare tali modelli di rhodopsine sia naturali che artificiali. Le metodologie sviluppate dovranno essere basate/integrate nella piattaforma OpenMolcas/Tinker. Lo sviluppo sarà complementato da attività di "benchmarking" su sistemi già conosciuti e studiati sperimentalmente e da attività di ricerca in cui gli strumenti sviluppati saranno anche utilizzati per studiare nuovi fotorecettori fluorescenti.

Descrizione della ricerca in inglese:

The researcher will be in charge of the development of methods for the automated construction, study and utilization of QM/MM models based on the CASPT2//CASSCF/6- 31G*/Amber protocol and employ such models to study the spectroscopic and photochemical properties of natural and artificial rhodopsins. The target is to find species with higher fluorescence quantum yield for optogenetics. The researcher shall also open a new route towards the generalization of such automatically constructed models. Such a generalization shall allow to study of rhodopsins, both natural and artificial, in general. The developed software shall be integrated into the OpenMolcas/Tinker framework. The software development will be complemented by suitable benchmarking activities involving a training set of experimentally studied systems. The developed methodologies will be applied to the study of new fluorescent photoreceptors.

o Attività affidate all'assegnista di ricerca:

L'assegnista sarà incaricato di ricercare computazionalmente nuove rodopsine fluorescenti e chiarire i meccanismi molecolari che ne determinano l'efficienza. La ricerca comprende lo sviluppo di strumenti software per costruire automaticamente modelli QM/MM basati sul protocollo CASPT2//CASSCF/6-31G* ed utilizzarli per studiare le proprietà spettroscopiche e fotochimiche di varie rodopsine naturali ed artificiali.

o Sede dell'attività di ricerca:

Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia

o Eventuale numero massimo di pubblicazioni da allegare alla domanda dell'assegnista: Responsabile scientifico dell'assegno di ricerca:

Il Direttore del Dipartimento