

Scheda per il conferimento di un incarico di ricerca art. 22-ter della Legge n. 240/2010

Numero posti richiesti	3
Durata del contratto	12 mesi
Gruppo scientifico disciplinare	03/CHEM-05
Settore Scientifico Disciplinare/Settori Scientifici Disciplinari	CHEM-05/A Organic Chemistry
CUP	F57G25000080006
Trattamento economico	€ 30100 lordo complessivo comprensivo degli oneri a carico dell'amministrazione per ciascuna posizione
Requisiti di ammissione	Chemistry e Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (classi LM 54, LM 13)
Progetto	PRODUZIONE DIFFUSA FOTOATTIVATA DI IDROGENO VERDE TRAMITE MATERIALI E PROCESSI SOSTENIBILI (SOLE-H2)
Progetto (ENG)	Distributed Photoactivated Production of Green Hydrogen via Sustainable Materials and Processes (SOLE-H2)
Finanziamento	MIN. AMBIENTE - PNRR INVESTIMENTO 3.5, MISSIONE 2, COMPONENTE 2
Responsabile del Progetto	Prof. Adalgisa Sinicropi
Tutor	Proff. Adalgisa Sinicropi, Luca De Vico, Maria Laura Parisi
Attività da svolgere (ITA)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Design <i>in silico</i> e caratterizzazione, mediante metodi della teoria del funzionale densità (DFT) e della sua estensione dipendente dal tempo (TDDFT), di nuovi fotosensibilizzatori per la generazione di idrogeno verde. 2. Design <i>in silico</i> e caratterizzazione, mediante metodi multiconfigurazionali con perturbazione del secondo ordine (MS-CASPT2) di nuovi fotosensibilizzatori per la generazione di idrogeno verde. 3. Valutazione della sostenibilità dei dispositivi photocatalitici e photoelettrochimici per la produzione di idrogeno verde mediante le metodologie LCA e LCC.
Attività da svolgere (ENG)	<ol style="list-style-type: none"> 1. <i>In silico</i> design and characterization of new photosensitizers for green hydrogen generation, using density functional theory (DFT) and its time-dependent extension (TDDFT). 2. <i>In silico</i> design and characterization of new photosensitizers for green hydrogen generation, using multiconfigurational second-order perturbation theory methods (MS-CASPT2). 3. Sustainability assessment of photocatalytic and photoelectrochemical devices for green hydrogen production, using life cycle assessment (LCA) and life cycle costing (LCC).
Sede di svolgimento delle attività	Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia
Numero massimo di pubblicazioni da allegare alla domanda	3

Eventuali ulteriori titoli richiesti
Colloquio	<i>NO</i>
Lingua straniera richiesta	<i>NO</i>

Firme del Responsabile Scientifico

.....