



SCUOLA  
NORMALE  
SUPERIORE



Finanziato  
dall'Unione europea  
NextGenerationEU



Ministero  
dell'Università  
e della Ricerca



Italiadomani  
PIANO NAZIONALE  
DI RIPRESA E RESILIENZA

## Allegato A - Temi di ricerca delle borse a tematica vincolata

<b>Corso Ph.D.</b>	<b>METODI E MODELLI PER LE SCIENZE MOLECOLARI</b>
<b>Tipo Borsa</b>	<b>MISSIONE 4 – ISTRUZIONE E RICERCA</b> <b>Investimento 4.1 - Dottorati di ricerca PNRR (art. 8, DM 118/2023)</b>
<b>Numero Borse</b>	2
<b>CUP</b>	E53C23001320001
<b>Titolo Borsa</b>	<b>1) Design computazionale di nuovi materiali per applicazioni nel campo delle fonti di energia rinnovabili</b> <b>2) Strategie computazionali per la simulazione della reattività atmosferica di specie molecolari in fase gassosa</b>
<b>Descrizione sintetica del progetto formativo</b>	<p>1) La borsa sarà principalmente rivolta a formare un profilo di una/o studiosa/o capace di affrontare lo studio di sistemi chimici complessi, che possano potenzialmente essere utilizzati nel design di nuovi materiali con impiego nell'ambito delle energie rinnovabili e a basso impatto ambientale. La/o studiosa/o userà tecniche allo stato dell'arte basate su modelli computazionali multiscala/multilivello ibridi quanto meccanici/classici anche in combinazione con dinamica molecolare.</p> <p>2) La borsa sarà principalmente rivolta a formare un profilo di una/o studiosa/o capace di affrontare le problematiche legate al cambiamento climatico con gli strumenti teorici e metodologici della chimica computazionale. La/o studiosa/o impiegherà tecniche e protocolli computazionali quantistici allo stato dell'arte per comprendere il meccanismo di degradazione di inquinanti atmosferici e la relativa cinetica chimica al fine di valutarne il tempo di vita e comprenderne il potenziale impatto ambientale.</p>
<b>SSD</b>	CHIM/02, CHIM/12
<b>Periodo da svolgere all'estero</b>	È obbligatorio lo svolgimento di periodi di studio e ricerca all'estero da un minimo di sei a un massimo di dodici mesi, elevabili a diciotto in caso di dottorati in cotutela. Le sedi estere ed eventualmente italiane verranno concordate dal collegio docenti con gli allievi e le allieve che risulteranno titolari della borsa.