



UNIVERSITÀ

1240



DIPARTIMENTO DI BIOTECNOLOGIE,
CHIMICA E FARMACIA

**SCHEDA PER BANDO DI SELEZIONE PUBBLICA PER TITOLI E COLLOQUIO PER IL CONFERIMENTO DI ASSEGNO DI RICERCA
(EX ART 22 L 240/2010)**

Allegato n._

Tipologia di assegno	ASSEGNO DI RICERCA lettera b)
Dipartimento	Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia
CUP	B53D23013640006
Importo lordo dell'assegno (nel rispetto del minimo fissato dal MUR ¹) (importo complessivo, compresi gli oneri a carico del datore di lavoro)	24000
Disponibilità di budget e imputazione dei costi dell'assegno, inclusi gli oneri a carico del datore di lavoro (indicare la stringa di progetto)	2022CXHY3A
Durata (mesi)	12
Rinnovabile	Sì
N. posti	1
Responsabile scientifico	Daniele Padula, Luca De Vico
Settore/i Scientifico/i Disciplinare/i	CHIM/06 - CHEM-05/A
Settore concorsuale	03/C1
Campo di ricerca ²	Chemistry
Progetto di ricerca	Enhancing Circularly Polarised Emitters Quantum Efficiency Exploiting Singlet-Triplet Inversion
Acronimo progetto di ricerca	INVESTCPE
Sede/i dell'attività di ricerca	Siena

¹ Indicare l'importo complessivo compresi gli oneri a carico del datore di lavoro, e l'importo lordo beneficiario.

² Ai fini della pubblicazione sul portale europeo, indicare un campo tra i seguenti: Agricultural sciences; Anthropology; Architecture; Arts; Astronomy; Biological sciences; Chemistry; Communication sciences; Computer science; Criminology; Cultural studies; Demography; economics; Educational sciences; Engineering; Environmental science; Ethics in Health sciences; Ethics in natural sciences; Ethics in physical sciences; Ethics in social sciences; Geography; History; Information science; Juridical sciences; Language sciences; Literature; Mathematics; Medical sciences; Neurosciences; Pharmacological sciences; Philosophy; Physics; Political sciences; Psychological sciences; Religious Sciences; Sociology; Technology; Other



Titolo del progetto (ITA)	<i>Identificazione computazionale di nuovi materiali per applicazioni nel campo dell'energia</i>
Titolo del progetto (ENG)	<i>Computational identification of new materials for energy applications</i>
Descrizione del progetto/tema di ricerca (ITA)	<i>L'obiettivo del progetto è di migliorare l'efficienza di emettitori di luce sfruttando eccezioni alla regola di Hund (inversione singoletto-tripletto). Progetteremo e caratterizzeremo computazionalmente un set di molecole organiche basate su cromofori che mostrano inversione singoletto-tripletto. L'applicazione di questi sistemi in OLED può aprire nuove strade viste le applicazioni nella vita quotidiana in dispositivi elettronici luminescenti (display etc.)</i>
Descrizione del progetto/tema di ricerca (ENG)	<i>The main objective of the project is to enhance the quantum efficiency of emitters exploiting singlet-triplet inversion on specifically engineered organic dyes. To this end, the project will design and computationally characterise a set of new molecules based on inverted singlet-triplet cores. Application of these systems in OLEDs finds wide impact in everyday life in lighting devices and consumer displays, such as smartphones, tablets and TVs.</i>
Attività affidate all'assegnista di ricerca (ITA)	<i>Il compito dell'assegnista è di progettare e caratterizzare computazionalmente nuovi materiali organici per applicazioni nel campo dell'energia. Più in dettaglio, verranno utilizzate tecniche di simulazione classiche e quantistiche per lo studio delle proprietà strutturali ed elettroniche. In particolare, è necessaria la conoscenza di metodi multiconfigurazionali per poter trattare in maniera corretta la correlazione elettronica responsabile per l'inversione tra i due stati.</i>
Attività affidate all'assegnista di ricerca (ENG)	<i>The tasks of the postdoctoral researcher is to design and computationally characterise new organic materials for applications in the energy domain. More in detail, the researcher will adopt classical and quantum simulation techniques to study structural and electronic properties. It is required the knowledge of multiconfigurational methods to properly treat electronic correlation responsible for the inversion.</i>
Numero massimo di pubblicazioni valutabili	2
Requisito di accesso	<i>LM-54, LM-17, LM-13</i>
Ulteriori titoli e requisiti richiesti ³ :	<i>Laurea</i>

³ Ad esempio (a titolo puramente indicativo): *Eventuale/i lingua/e straniera/e richiesta/e; Livello avanzato di conoscenza scritta e parlata di una o più lingue straniere; Esperienza lavorativa e/o formativa presso strutture di ricerca pubbliche e/o private; Esperienze in ambito internazionale*



UNIVERSITÀ

1240



DIPARTIMENTO DI BIOTECNOLOGIE,
CHIMICA E FARMACIA

Siena, data della firma digitale

Il Responsabile scientifico

Prof. Daniele Padula, Prof. Luca De Vico