

**Assegno di ricerca biennale:  
"Studio computazionale della reattività in fase gassosa nella troposfera terrestre"**

**Piano di Attività e Progetto di Ricerca**

*Progetto di Ricerca*

Il progetto di ricerca PRIN 2022 PNRR "GASCHEM4air – GAS-phase CHEMistry for AIR quality modeling" si prefigge di migliorare la conoscenza della chimica della troposfera attraverso l'individuazione di reazioni chiave le cui informazioni termochimiche e/o cinetiche sono mancanti o inaccurate. Allo scopo di colmare tali lacune, è prevista la messa a punto di una strategia che combina esperimento e teoria per ottenere dati cinetici accurati. Il risultato finale sarà la messa a punto di un database pubblico.

Nell'ambito di tale progetto, l'attività di ricerca da svolgersi nell'ambito del presente assegno di ricerca copre di questi aspetti quelli principalmente legati allo studio computazionale della termochimica e della cinetica di reazioni chiave per la chimica dell'atmosfera. In dettaglio, gli obiettivi prefissati sono:

- 1) Lo studio computazionale della reattività di molecole modello con il radicale OH.
- 2) Lo studio computazionale della reattività di molecole modello con il radicale NO<sub>3</sub>.
- 3) Il contributo alla messa a punto di una strategia integrata esperimento e teoria e di un database cinetico pubblico.

Il candidato dedicherà interamente i 24 mesi della sua attività di ricerca alla realizzazione degli obiettivi del suddetto progetto PRIN 2022 PNRR "GASCHEM4air – GASCHEM4air – GAS-phase CHEMistry for AIR quality modeling".

*Piano di attività*

- Nel primo anno di attività l'assegnista di ricerca si occuperà dello studio, dal punto di vista termochimico e cinetico, di reazioni tra idrocarburi insaturi e modelli di VOC (volatile organic compounds) con il radicale OH.
- Nel secondo anno di attività l'assegnista di ricerca si occuperà dello studio, dal punto di vista termochimico e cinetico, di reazioni tra idrocarburi insaturi e modelli di VOC (volatile organic compounds) con il radicale NO<sub>3</sub>.

- In contemporanea agli studi di reattività, l'assegnista di ricerca collaborerà:
  - 1) alla messa a punto di una strategia integrata esperimento-teoria per lo studio di reazioni chimiche importanti per la troposfera;
  - 2) alla messa a punto di un database cinetico.