

Progetto di ricerca: Studio teorico di molecole chirali di interesse astrobiologico

Il progetto della Borsa di Ricerca prevede lo sviluppo di approcci computazionali per la simulazione di proprietà elettroniche e reattività di sistemi molecolari eventualmente adsorbiti su materiali plasmonici nanostrutturati. Sarà inoltre svolta attività di ricerca inerente le simulazioni di possibili vie di sintesi di molecole chirali a partire da specie molecolari individuate nel mezzo interstellare. La ricerca si concentrerà in particolare su molecole chirali di interesse astrobiologico, al fine di fornire un contributo allo studio di origini ed evoluzione dei composti organici di rilevanza biologica nello Spazio.

L'attività di ricerca prevederà la progettazione di molecole o complessi molecolari, lo studio di ottimizzazione della geometria di tali composti, lo studio delle energie e proprietà elettroniche di tali composti, la valutazione dei risultati ottenuti e l'analisi critica in riferimento alla letteratura del settore.

Piano di attività

Il piano di attività prevede che il titolare della borsa di ricerca si occupi dello sviluppo dei metodi computazionali necessari allo svolgimento delle attività e alla loro applicazione alle molecole selezionate nell'ambito del progetto, in particolare:

- studio dei dati disponibili in letteratura;
- selezione dell'approccio computazionale più adeguato;
- progettazione delle molecole e/o dei complessi molecolari di interesse;
- ottimizzazione della geometria di tali molecole / complessi molecolari;
- studio delle proprietà elettroniche e reattività dei composti
- valutazione critica dei risultati ottenuti;
- redazione dei report delle attività.