



BANDO N. 5_2023 PER BORSA DI RICERCA
SELEZIONE PER L'ATTRIBUZIONE DI N. 1 BORSA DI RICERCA DAL TITOLO
"Simulazioni al computer di processi di adsorbimento all'interno di materiali mesoporosi a base di silice attraverso i metodi Monte Carlo Gran Canonico, Dinamica Molecolare e calcoli DFT"
Responsabile Scientifico **Prof. Mariano Andrea Scorciapino**

IL DIRETTORE

- VISTO** lo Statuto dell'Università degli Studi di Cagliari, emanato con D.R. n° 339 del 27.03.2012, e successive modifiche ed integrazioni;
- VISTA** la Legge 30.12.2010, n° 240, recante "norme in materia di organizzazione delle università, di personale accademico e reclutamento, nonché delega del Governo per incentivare la qualità e l'efficienza del sistema universitario", ed in particolare l'art. 18, co.5, lett. f;
- VISTA** la legge 04.04.2012, n° 35 di "Conversione in legge, con modificazioni, del decreto legge 9 febbraio 2012, n° 5, recante disposizioni urgenti in materia di semplificazione e di sviluppo" ed in particolare l'art. 49, comma 1, lett. h), che modifica l'art. 18, comma 5, lett. f) della suddetta legge 240/2010;
- VISTO** il vigente Regolamento di Ateneo per il conferimento delle borse di ricerca;
- VISTO** il progetto di ricerca Sorbents for environmental applications: a synergetic computational modelling and experimental approach
- VISTA** la richiesta del Prof. Andrea Scorciapino di avvio delle procedure di selezione per il conferimento di n. 1 (una) borsa di ricerca della durata di mesi 9 e dell'importo di € 10800.00 lordi, comprensivi degli eventuali oneri a carico dell'Ateneo, dal titolo **"Simulazioni al computer di processi di adsorbimento all'interno di materiali mesoporosi a base di silice attraverso i metodi Monte Carlo Gran Canonico, Dinamica Molecolare e calcoli DFT"**
- VISTO** la delibera n. 087 del 21/03/2023 verbale n. 7 con la quale il Consiglio del Dipartimento approva all'unanimità la proposta avanzata dal Prof. Mariano Andrea Scorciapino
- ACCERTATA** la copertura finanziaria sui progetti:
RICALTRO_CTC_2022_CONTR_FDS_2021_SCORCIAPINO - PROGETTI DI RICERCA FINANZIATI DALLA FONDAZIONE DI SARDEGNA – ANNUALITA'2021
A.15.01.02.04.01.01 - Progetti con enti e privati - parte esercizio
Cup F73C22001190007 (€ 10.765,7)
- RICALTRO_CTC_2022_CONTR_FDS_2021_ROMBI - PROGETTI DI RICERCA FINANZIATI DALLA FONDAZIONE DI SARDEGNA – ANNUALITA'2021
A.15.01.02.04.01.01 - Progetti con enti e privati - parte esercizio
Cup F73C22001190007 (€ 35.00)

DISPONE

ARTICOLO UNO

(Caratteristiche)

È indetta la selezione pubblica, per titoli e colloquio, per il conferimento di n. 1 (una) borse di ricerca con le seguenti caratteristiche:



Provenienza fondi: Fondazione di Sardegna

Progetto: Sorbents for environmental applications: a synergetic computational modelling and experimental approach

Scadenza progetto: 21 ottobre 2024

Struttura presso la quale si svolgerà l'attività: Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche

Responsabile Scientifico: Prof. Mariano Andrea Scorciapino

Durata: 9 mesi

Importo (al lordo degli eventuali oneri a carico dell'Ateneo): € 10800.00

Titolo (Italiano) "Simulazioni al computer di processi di adsorbimento all'interno di materiali mesoporosi a base di silice attraverso i metodi Monte Carlo Gran Canonico, Dinamica Molecolare e calcoli DFT"

Oggetto del programma e/o della specifica ricerca (Italiano):

Il/La borsista opererà insieme al Gruppo di Spettroscopia Applicata e Modellazione Molecolare per l'esecuzione e l'analisi di simulazioni al computer volte allo studio dei processi di adsorbimento di gas (e.g. azoto, anidride carbonica, metano, acqua, ..., e loro miscele) e di ossidi di arsenico in soluzione, sulla superficie di materiali mesostrutturati a base di silice. I modelli delle matrici saranno realizzati al computer tenendo conto delle informazioni sperimentali a disposizione, e varieranno per dimensione dei pori, spessore della parete dei pori, presenza/assenza di interconnessioni tra i pori. Le simulazioni verranno condotte sia in assenza che in presenza di selezionate unità funzionalizzanti di natura organica (prevalentemente ammine), le quali potranno essere inserite mediante grafting computazionale o conducendo delle dinamiche molecolari volte ad ottenere l'impregnazione del materiale. L'obiettivo è l'ottenimento di informazioni macroscopiche quali, la capacità di carico e la selettività nei confronti delle diverse specie in funzione delle diverse caratteristiche del materiale sorbente e delle diverse condizioni operative, e la correlazione dei risultati ai dettagli microscopici di posizione e orientazione delle molecole di sorbato all'interno dei pori del materiale sorbente e delle eventuali unità funzionalizzanti o dell'acqua presenti all'interno dei pori, nonché alle loro reciproche interazioni. Allo scopo, verranno impiegate metodologie Monte Carlo Gran Canonico combinate a Dinamica Molecolare classica e calcoli di tipo DFT

Titolo (in Inglese): Computer simulations of adsorption processes inside silica-based mesoporous materials through Grand Canonical Monte Carlo, Molecular Dynamics and DFT methods

Oggetto del programma e/o della specifica ricerca (Inglese):

The fellow will work together with the Applied Spectroscopy and Molecular Modeling Group for the execution and analysis of computer simulations, aimed at studying the processes of gas adsorption (e.g. nitrogen, carbon dioxide, methane, water, ..., and their mixtures) and arsenic oxides in solution, on the surface of silica-based mesostructured materials. The models will be generated by taking the available experimental information into account, and they will vary in pore size, pore wall thickness, presence/absence of interconnections between pores. The simulations will be conducted both in the absence and in the presence of selected functionalizing units of organic nature (mainly amines), which can be inserted by computational grafting or by conducting molecular dynamics aimed at obtaining the impregnation of the material. The objective is to obtain macroscopic information such as the loading capacity and selectivity towards the different species according to the different characteristics of the sorbent material and the different operating conditions. Results will be correlated to the microscopic details of position and



orientation of the sorbate molecules inside the pores of the sorbent and of any functionalizing units or water molecules present inside the pores, as well with their mutual interactions. Grand Canon Monte Carlo methodologies will be used in combination with classical Molecular Dynamics, together with DFT calculations.

ARTICOLO DUE

(Requisiti per l'accesso, incompatibilità)

Possono partecipare alla selezione i candidati che alla data di scadenza del termine utile per la presentazione della domanda di partecipazione, sono in possesso di:

- A) Laurea Magistrale in Scienze Chimiche
- B) Documentata esperienza nell'impostazione, realizzazione e analisi di simulazioni di dinamica molecolare e/o Monte Carlo

Eventuali altri titoli

- A) Voto di Laurea
- B) Dottorato di ricerca
- C) Esperienze lavorative di ricerca scientifica presso enti pubblici o privati, ivi compreso il dottorato di ricerca qualora non sia stato acquisito il titolo
- D) Pubblicazioni scientifiche su riviste internazionali indicizzate su Scopus oppure Web of Science, ad eccezione degli Abstract da atti di convegno
- E) Scuole e Corsi di Formazione esclusi i corsi di lingua
- F) Partecipazione a Congressi e Convegni come relatore
- G) Attestati di lingue straniere

La partecipazione alla selezione è libera, senza limitazioni in relazione alla cittadinanza.

La borsa di ricerca non è cumulabile con altre borse a qualsiasi titolo conferite, tranne con quelle concesse da Istituzioni nazionali o straniere utili ad integrare, con soggiorni all'estero, l'attività del borsista.

La borsa di ricerca è incompatibile con la frequenza di corsi di dottorato di ricerca con borsa e di specializzazione in Italia e all'estero.

La borsa di ricerca è incompatibile con rapporti di lavoro subordinato, fatta salva la possibilità che il borsista sia collocato in aspettativa senza assegni.

La borsa di ricerca è incompatibile con rapporti di lavoro autonomo, anche parasubordinato.

Nel solo caso di lavoro autonomo occasionale, è fatta salva l'ipotesi in cui sia dichiarata da parte del Responsabile Scientifico la compatibilità di tale attività con l'esercizio dell'attività di formazione di cui alla borsa di ricerca.

La durata complessiva dei rapporti instaurati con i titolari di borsa, assegno di ricerca di cui all'art. 22 della L. 240/2010 e contratti di cui all'art. 24 L. 240/2010 non può superare i dodici anni, anche non continuativi. Ai fini della durata dei predetti rapporti non si rilevano i periodi trascorsi in aspettativa per maternità o per motivi di salute secondo la normativa vigente.

ARTICOLO TRE

(Domanda di partecipazione)

Le domande di ammissione alla selezione, redatte su carta semplice secondo lo schema in **Allegato A** potranno essere inviate:



- all' indirizzo PEC: protocollo@pec.unica.it,
- con consegna a mano, dal lunedì al venerdì dalle 10.00 alle 13.00 esclusi giorni festivi;
- a mezzo servizio postale con avviso di ricevimento;

presso: Università degli Studi di Cagliari, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Segreteria Amministrativa, Asse Dipartimentale Chimica Blocco D, Piano terra, Cittadella Universitaria S.S. 09042 Monserrato (CA), **improrogabilmente entro il 20° GIORNO alle ore 13.00 dalla data di pubblicazione sul sito: /www.unica.it/unica/.**

Non si terrà conto delle domande pervenute oltre il termine di scadenza.

Alla domanda il candidato dovrà allegare:

- a) **autocertificazione relativa al luogo di nascita, cittadinanza, residenza, codice fiscale e alla insussistenza delle situazioni di incompatibilità** di cui all'art. 2 del presente bando;
- b) **curriculum formativo e professionale** (All. E)
- c) **dichiarazione sostitutiva di certificazioni**, rilasciata ai sensi del D.P.R. 28.12.2000, n° 445, relativamente al possesso dei titoli valutabili, redatta secondo lo schema in All. B, con tutti gli elementi richiesti;
- d) **pubblicazioni**, allegate in copia originale, ovvero in copia fotostatica con allegata dichiarazione sostitutiva di atto di notorietà attestante la conformità all'originale (All. C), rilasciata ai sensi del D.P.R. 28.12.2000, n. 445;
- e) se i titoli di studio richiesti per l'accesso sono stati conseguiti all'estero, **copia del provvedimento di riconoscimento** che ne attesta la validità in Italia. Nel caso in cui detto riconoscimento non sia ancora stato effettuato, l'equivalenza verrà valutata, unicamente ai fini dell'ammissione del candidato alla selezione, dalla Commissione Giudicatrice;
- f) **fotocopia fronte/retro di un documento di identità in corso di validità**;
- g) **fotocopia fronte/retro della tessera sanitaria**
- h) **elenco** in carta libera dei documenti e dei titoli presentati in allegato alla domanda.

Sulla busta il candidato dovrà riportare:



Cognome e nome, recapito;

Domanda di partecipazione: Selezione Borsa di Ricerca n. 5_2023

Responsabile scientifico: Prof. Mariano Andrea Scorciapino

Non saranno presi in considerazione i titoli presentati a questa Amministrazione oltre il termine utile per la presentazione delle domande di partecipazione alla selezione.

ARTICOLO QUATTRO

(Commissioni giudicatrici e selezione dei candidati)

La Commissione giudicatrice è nominata, ai sensi dell'art. 5, comma 1 del Regolamento d'Ateneo, con Disposizione Direttoriale, ed è composta di norma, da tre docenti di ruolo afferenti a settori scientifico disciplinari affini alla tematica della ricerca. La Commissione giudicatrice può altresì essere integrata da uno o più componenti designati dal soggetto finanziatore in qualità di esperti.

La Commissione giudicatrice, verificati i requisiti di ammissione, definisce preliminarmente le modalità e i criteri di valutazione dei titoli previsti nel bando ed il punteggio minimo per l'ammissione al colloquio, disponendo di 100 punti, di cui 60 punti per la valutazione dei titoli e 40 per la valutazione del colloquio.

La selezione avviene mediante la valutazione preliminare dei titoli presentati da ciascun candidato con l'attribuzione del relativo punteggio, ed in un successivo colloquio volto ad accertare l'idoneità dei candidati ammessi.

Gli esiti della valutazione dei titoli e l'elenco dei candidati ammessi al colloquio sono pubblicati nel sito web del Dipartimento e nel sito dell'Ateneo.

Ai candidati ammessi sarà comunicata tramite posta elettronica e/o pubblicazione sul medesimo sito web, la data l'ora e la sede di svolgimento del colloquio, con un preavviso di almeno 15 giorni.

I candidati, per sostenere la prova, dovranno esibire un valido documento di riconoscimento.

Il colloquio potrà avvenire in forma telematica.

Sono titoli valutabili:



A) Voto di Laurea Magistrale (fino a 15 punti)

- votazione 110 e 110 con lode: punti 15
- votazione da 106 a 109: punti 13
- votazione da 100 a 105: punti 11
- votazione da 90 a 99: punti 6
- votazione inferiore a 90: punti 3

B) Dottorato di Ricerca (fino a 10 punti)

- Dottorato fortemente attinente (argomento di tesi e tecniche di indagine): punti 10
- Dottorato discretamente attinente (tecniche di indagine): punti 8
- Dottorato sufficientemente attinente (argomento di tesi): punti 6
- Dottorato non attinente: punti 4

C) Esperienze lavorative di ricerca scientifica presso enti pubblici o privati, ivi compreso il dottorato di ricerca qualora non sia stato acquisito il titolo (fino a 12 punti)

- attività discretamente attinente (tecniche di indagine) oppure fortemente attinente (oggetto di studio e tecniche di indagine): 1 punto ogni 4 mesi
- attività non attinente oppure sufficientemente attinente (oggetto di studio): 1 punto ogni 6 mesi

D) Pubblicazioni scientifiche su riviste internazionali indicizzate su Scopus oppure Web of Science, ad eccezione degli Abstract da atti di convegno (fino a 10 punti)

- fortemente attinente (argomento e tecniche di indagine): punti 3
- discretamente attinente (tecniche di indagine): punti 2
- sufficientemente attinente (argomento): punti 1
- non attinente: punti 0,5

E) Scuole e Corsi di Formazione esclusi i corsi di lingua (fino a 4 punti)

- attinente alle attività previste dal presente incarico: punti 2 per ogni corso
- non attinente alle attività previste dal presente incarico: punti 1 per ogni corso

F) Partecipazione a Congressi e Convegni come relatore (fino a 6 punti)

- relazione orale: punti 2
- relazione poster: punti 1

G) Attestati di lingue straniere (fino a 3 punti)

- livello C2: punti 3
- livello C1: punti 2,5
- livello B2: punti 2
- livello B1: punti 1,5
- livello A2: punti 1
- livello A1: punti 0,5

Per quanto riguarda il punteggio del colloquio, i criteri per l'attribuzione del punteggio sono i seguenti:

- Conoscenza dei fondamenti teorici e pratici sull'impostazione, realizzazione ed analisi di simulazioni classiche di dinamica molecolare e con metodi Monte Carlo, nonché sull'impostazione ed esecuzione



di calcoli con metodi DFT, relativamente agli argomenti oggetto della presente selezione fino ad un massimo di 30 punti;

- Conoscenza generale degli argomenti oggetto della presente selezione con particolare riferimento ai fenomeni di adsorbimento, struttura e performance dei materiali porosi a base di silice per la cattura di gas, fino ad un massimo di 10 punti.

Al termine dei lavori valutativi, la commissione compilerà la relativa graduatoria di merito sulla base della somma dei punteggi riportati da ciascun candidato rispettivamente nella valutazione dei titoli e nel colloquio. A parità di punteggio prevale il candidato più giovane.

Gli esiti della selezione sono pubblicati nel sito web del Dipartimento, sezione Atti Amministrativi>Bandi e Selezioni

ARTICOLO CINQUE

(Conferimento della borsa di ricerca, avvio e conclusione dell'attività)

Gli atti sono approvati con Disposizione Direttoriale, previo accertamento dei requisiti richiesti e pubblicati sul sito web del Dipartimento e dell'Ateneo.

La data di inizio e le modalità di svolgimento dell'attività di ricerca presso la struttura universitaria di riferimento, alla quale il borsista ha diritto di accedere con l'obbligo di osservarne le norme regolamentari e di sicurezza, devono essere concordate con il Responsabile scientifico in accordo con il Direttore del Dipartimento.

Il titolare della borsa è tenuto a stipulare adeguata polizza assicurativa personale obbligatoria sia contro il rischio di infortuni verificatisi durante il periodo di presenza presso le strutture universitarie, ovvero presso strutture esterne presso le quali il borsista è stato previamente autorizzato dal Responsabile Scientifico a svolgere la propria attività, sia per la responsabilità civile verso terzi, eventualmente derivanti dai danni a persone o cose provocati dal medesimo, copia della quale dovrà essere consegnata all'amministrazione alla data di inizio delle attività di ricerca presso questa università.

Il pagamento della borsa di ricerca è effettuato in rate mensili posticipate.

L'attività del borsista deve concludersi entro e non oltre la data di scadenza del progetto di ricerca indicata all'art. 1.



Al termine del periodo previsto per l'esecuzione della ricerca, il borsista è tenuto a presentare al Direttore del Dipartimento una dettagliata relazione sull'attività svolta e sui risultati conseguiti, preventivamente approvata dal Responsabile Scientifico.

Il godimento della presente borsa di ricerca non determina l'instaurazione di un rapporto di lavoro, non dà luogo a trattamenti previdenziali, a valutazioni ai fini di carriere giuridiche ed economiche, né a riconoscimenti automatici ai fini previdenziali.

ARTICOLO SEI

(Trattamento dei dati personali e diritto di accesso agli atti)

L'Università degli Studi di Cagliari è titolare del trattamento dei dati personali ai sensi delle norme del regolamento (UE) 2016/679 del Parlamento europeo e del Consiglio, del 27 aprile 2016, e del Codice in materia di protezione dei dati personali D. Lgs. 196/2003, nel rispetto della dignità umana, dei diritti e delle libertà fondamentali della persona. L'informativa sul trattamento dati per la categoria di interessato "Cittadini" e "Collaboratori" è pubblicata sul sito https://www.unica.it/unica/it/utility_privacy.page

Ai sensi di quanto disposto dall'art. 5 della legge 7 agosto 1990, n.- 241, il responsabile della procedura selettiva di cui al presente bando è il Segretario Amministrativo del Dipartimento, dott.ssa Alessandra Secchi. I candidati hanno facoltà di esercitare il diritto di accesso agli atti del procedimento concorsuale secondo le modalità previste dal D.P.R. 184 del 12.4.2006 (Regolamento recante disciplina in materia di accesso ai documenti amministrativi).

ARTICOLO SETTE

(Pubblicità e norme di salvaguardia)

Il presente bando verrà pubblicato sul sito internet dell'Ateneo (www.unica.it) e sul sito del Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche: <http://dipartimenti.unica.it/scienzechimichegeologiche/>

Per quanto non specificato nel presente bando, si fa riferimento alle norme contenute nella L. 240/2010 e nel vigente Regolamento per la disciplina delle Borse di Ricerca di questa Università.

Il Direttore del Dipartimento
Prof. Antonio Funedda
Sottoscritto con firma digitale