

Si desidera rendere nota la disponibilità di un **assegno di ricerca di 12 mesi** presso il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Padova – **Responsabile Scientifico Dr. Frezzato Diego, Gruppo di Chimica Teorica.**

Il bando, con **scadenza 30.10.2024**, è pubblicato alla pagina [https://protocollo.unipd.it/albo/viewer \(numero 5965\)](https://protocollo.unipd.it/albo/viewer(numero%205965))

Il titolo dell'attività* è “***Interrelazioni tra velocità, precisione e dissipazione di energia in network di reazioni chimiche in stato stazionario di non-equilibrio***”

L'attività di ricerca sarà di tipo teorico-computazionale e riguarderà la simulazione di network di reazioni chimiche in condizioni di stato stazionario. Tali network verranno analizzati dal punto di vista della singola molecola “tagged” allo scopo di fare emergere interrelazioni generali tra 1) velocità di realizzazione di eventi target, 2) precisione nella realizzazione, 3) tasso medio di dissipazione allo stato stazionario. I risultati generali verranno poi testati su network di rilevanza (bio)chimica. Successivamente, il focus si sposterà su sistemi del tipo reazione-fluttuazione con accoppiamento tra processi di salto tra stati discreti e diffusione configurazionale. Anche in questo ambito verrà esplorata l'esistenza di interrelazioni generali velocità-precisione-dissipazione; la teoria verrà elaborata per prototipi di motori molecolari multi-stato. Sono previste interazioni con gli altri partner del progetto* all'interno del quale si colloca questa specifica attività.

Profilo dei candidati. È richiesta laurea magistrale (requisito minimo) o dottorato di ricerca (titolo da conseguire entro dicembre 2024) in Chimica, Fisica, o discipline pertinenti all'attività di ricerca. Il bando è rivolto a candidati con background teorico-computazionale e con conoscenze basilari di cinetica chimica e di statistica in ambito chimico-fisico. È inoltre richiesta la capacità di sviluppare codici di calcolo in modo autonomo.

Per informazioni: diego.frezzato@unipd.it

* L'attività si colloca all'interno del progetto “*Harnessing Non-Equilibrium Chemistry for the Development of Receptors, Catalysts, and Materials with Enhanced Properties*” (referente prof. Leonard Prins, UniPD) finanziato dalla Fondazione CARIPARO, anno 2023.