

DOTTORATO IN SCIENZE CHIMICHE

Coordinatrice prof.ssa Anna Maria Papini

ciclo XLI - a.a. 2025/2026

AREA	SCIENTIFICA
SEDE AMMINISTRATIVA	Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff" (DICUS)
WEB	www.dottoratoscienzachimiche.unifi.it
CURRICULA	<ol style="list-style-type: none">1. Chimica2. Scienza per la Conservazione dei Beni Culturali
POSTI A CONCORSO: 14 Con borsa: 14 Senza borsa: <i>non previsti</i>	
BORSE IN GRADUATORIA ORDINARIA: 2	Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff" - DICUS Progetto Ministeriale "Dipartimenti Eccellenti 2023-2027" 58503_DIPECC_23_27 CUP: B97G22000740001 Dipartimento di eccellenza 2023-2027
BORSE A TEMATICA VINCOLATA CON GRADUATORIA SEPARATA: 12	1 - Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff" - DICUS Tematica: "Design computazionale di nanografeni magnetici attraverso metodi ab initio e AI." Descrizione del progetto: La borsa di dottorato è finanziata dal Fondo Italiano per la Scienza (Bando FIS 2), attraverso lo Starting Grant 'IPAWNS'. Capire come controllare l'interazione di scambio magnetico attraverso l'applicazione di un campo elettrico in materiali basati su nanografeni open-shell aprire la strada al calcolo quantistico basato su molecole paramagnetiche. L'attività di ricerca verterà sullo sviluppo di metodi ab initio per modellizzare le proprietà elettroniche e magnetiche di nanografeni magnetici, e alla ottimizzazione di protocolli high-throughput per la simulazione di un elevato numero di sistemi molecolari mediante software di chimica quantica. Lo studente di dottorato dovrà quindi sviluppare metodologie per i) generare nuove strutture e ii) automatizzare il calcolo delle proprietà magnetiche di interesse, in particolare l'interazione di scambio. Sarà necessaria l'integrazione di approcci post-Hartree Fock (post HF) e teoria del funzionale densità (DFT), insieme a tecniche avanzate per modellizzare gli accoppiamenti spin-elettrici. Verranno utilizzate approssimazioni isolate e periodiche per derivare i parametri dell'hamiltoniano di spin, in particolare le interazioni di scambio. Il database generato sarà poi utilizzato per allenare modelli AI predittivi per prevedere e generare nuovi sistemi con le proprietà magnetiche desiderate. Il ricercatore avrà l'opportunità di partecipare a tutte le fasi di ricerca, venendo così esposto ad un contesto interdisciplinare. In particolare potrà partecipare allo

sviluppo di modelli di deep learning predittivi per prevedere rapidamente il comportamento delle nuove strutture NGS, e alla creazione di modelli di deep learning generativi per progettare geometrie NGS ottimizzate per il massimo accoppiamento spin-elettrico.

Referente scientifico: Dott. Matteo Briganti

Finanziata su fondo FIS2_2023_BRIGANTI IPAWNS - In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates CUP B53C24009560001

1 - Cofinanziamento Università degli Studi di Firenze e CSGI Consorzio Interuniversitario per lo Sviluppo dei Sistemi a grande interfase

Tematica: "Tensioattivi "green", idro- e organo- gel e nanogel per il confinamento e rilascio controllato di composti chimici e principi attivi"

Descrizione del progetto: Il rilascio controllato di composti sulla superficie delle opere è cruciale nei metodi chimici per la conservazione, in particolare nella rimozione selettiva di sporco, coating invecchiati e vandalismi. Tensioattivi e gel costituiscono i principali materiali per realizzare sistemi a rilascio controllato. In particolare, il progetto riguarda lo studio di nuovi tensioattivi basati su gliceroli, e idro- o organo- gel e nanogel di polimeri sintetici o bio, per confinare e rilasciare solventi o soluzioni acquose su superfici (dipinti sporchi/verniciati, dipinti murali, ecc.). Il progetto include la formulazione, caratterizzazione chimico-fisica e applicazione dei nuovi sistemi, con potenziale impatto in tutti i campi dove il rilascio controllato sia essenziale (detergenza, drug-delivery, ecc.).

Referente scientifico: Prof. David Chelazzi

1 - Cofinanziamento Università degli Studi di Firenze e CIRMMP Consorzio interuniversitario risonanze magnetiche di metalloproteine paramagnetiche

Tematica: "Sviluppo di agenti di polarizzazione per la tecnica di Polarizzazione Dinamica Nucleare applicata all'NMR di fase solida."

Descrizione del progetto: La tecnica DNP (Dynamic Nuclear Polarization) applicata all'NMR di fase solida è una delle più promettenti tecniche NMR emerse negli ultimi anni, e permette di aumentare il segnale degli spettri NMR di un fattore 500. Questo ha rivoluzionato l'indagine NMR, per esempio, permettendo la determinazione strutturale di molecole presenti sulla superficie di materiali. L'agente di polarizzazione, uno specifico radicale paramagnetico, gioca un ruolo chiave permettendo il trasferimento di magnetizzazione sui nuclei, che sta alla base dell'amplificazione del segnale. Nel presente progetto lo studente dovrà sviluppare nuovi agenti di polarizzazione, combinando uno studio di simulazione computazionale su nuove molecole, con la verifica sperimentale tramite esperimenti di DNP NMR, e sviluppare nuovi approcci sperimentali per la caratterizzazione di materiali innovativi.

Referente scientifico: Prof. Moreno Lelli

9 - Cofinanziamento Università di Firenze e Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff" - DICUS

Tematica 1: "Studio computazionale di nanografeni magnetici assorbiti su superficie."

Descrizione del progetto: Il progetto di ricerca, finanziato dal Fondo italiano per la scienza - Bando FIS 2, si propone di sviluppare sistemi basati su strutture molecolari di grafene assorbite su superficie che presentano elettroni spaiati (Spin Nanografenici) e interazioni di scambio modulabili. Questi sistemi open-shell sono dei promettenti componenti per porte logiche quantistiche. Lo scopo dell'attività di

ricerca quello di razionalizzare l'accoppiamento magnetico in funzione della loro struttura molecolare in modo tale da poter essere d'indirizzo per la sintesi e lo sviluppo di nuove strutture. Sarà necessario progettare, coerentemente alle necessità di accuratezza dei risultati, diverse tipologie di esperimenti in silico multiscala basati sulla teoria del funzionale densità periodico.

Referente scientifico: Prof. Matteo Briganti

Cofinanziata su fondo FIS2_2023_BRIGANTI IPAWNS - In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates CUP B53C24009560001

Tematica 2: "Sostenibilità, elettrodeposizione e recupero metalli nel Made in Italy e per la produzione e uso di idrogeno."

Descrizione del progetto: La sostenibilità nei processi di elettrodeposizione che riducono le quantità di metallo usate sono un argomento di studio in forte evoluzione, multidisciplinare che coinvolge diversi settori della Chimica e non solo. La ricerca prevede simulazioni teoriche, studio dei processi di elettrodeposizione con tecniche innovative con il contemporaneo uso di tecniche analitiche per la valutazione della resistenza alla corrosione e della variazione composizionale, morfologica e strutturale dei depositi. La ricerca nel campo del recupero dei metalli da ogni scarto produttivo o da ogni rifiuto sarà centrale e strategico per la circolarità dei processi industriali studiati ma anche per l'approvvigionamento di metalli e il loro uso nel campo energetico.

Referente scientifico: Prof. Massimo Innocenti

Cofinanziata su fondi INNOCENTIAMPERE - INNOCENTI-ITALFIMET21 - INNOCENTI-3M

Tematica 3: "Strutture biocompatibili e multivalenti per la presentazione o il riconoscimento di antigeni tumorali."

Descrizione del progetto: Sviluppo di strutture multivalenti e/o pre-organizzate che verranno bioconiugate con antigeni anche di tipo saccaridico o loro mimetici. I bioconiugati ottenuti saranno caratterizzati e studiati per le loro proprietà di attivazione del sistema immunitario e interazione con specifiche lectine.

Referente scientifico: Prof. Cristina Nativi

Cofinanziata su fondi DM737_BANDO_SENIOR_MERMAID_CRISTINANATIVI CUP B55F21007810001 - NATIVI_AIRC_IG2021_ID25762 CUP B99J21025210007 - CRISTINANATIVIPRIN2015 CUP B96J15002080001

Tematica 4: "Sviluppo di strutture ibride molecolari a multistrato per dispositivi ottici."

Descrizione del progetto: L'attività sarà incentrata sullo sviluppo e l'analisi chimica e fisica di film sottili molecolari e inorganici, fabbricati mediante tecniche che includono approcci chimici da soluzione e metodi di deposizione fisica da fase vapore. Le proprietà dei materiali saranno studiate tramite microscopie avanzate e spettroscopia di fotoemissione. Una parte fondamentale dell'attività sarà l'ottimizzazione dei depositi per cavità ottiche funzionanti da unità laser, nell'ambito del progetto APACE, HORIZON-EIC PATHFINDER CHALLENGES 2023. Il progetto adotta un approccio ispirato a principi biologici per lo sviluppo di laser attivati dalla luce solare ed include sia la deposizione di sistemi biomolecolari e dye come mezzi attivi che quella di film metallici utilizzati come specchi delle cavità.

Referente scientifico: Prof. Matteo Mannini

Cofinanziata su fondo CELARDOAPACE24 progetto APACE — HORIZON-EIC-2023-PATHFINDERCHALLENGES-01 CUP B93C24000830006 presso Dipartimento di Fisica

e Astronomia

Tematica 5: “Selettività di spin indotta dalla chiralità in sistemi molecolari nanostrutturati.”

Descrizione del progetto: L’attività di ricerca verrà svolta nell’ambito del progetto ERC Synergy CASTLe (www.castle.unifi.it) e riguarderà la progettazione, preparazione e caratterizzazione di sistemi molecolari nanostrutturati con i quali investigare il fenomeno della selettività di spin indotta dalla chiralità. I metodi di preparazione potranno comprendere sia processi di autoassemblaggio da soluzione che deposizioni per via termica o mediante elettro-spray. La caratterizzazione potrà utilizzare metodi di indagine basati su misure di trasporto elettronico e magnetotrasporto su molteplici scale (dispositivi, nanogiunzioni, microscopie a scansione di sonda) combinati con tecniche spettroscopiche di vario tipo (ottiche, fotoelettroniche e di risonanza magnetica).

Referente scientifico: Prof. Roberta Sessoli

Cofinanziata su fondo SESSOLI_ERC-2022-SYG_CASTLE - Chirality and spin selectivity in electron transfer processes: from quantum detection to quantum enabled technologies CUP B97G21000120006 Progetto UE Horizon Europe

Tematica 6: “Studio del meccanismo di azione di composti metallici ad attività farmacologica mediante approcci multiomici.”

Descrizione del progetto: I composti metallici ad attività farmacologica sono generalmente caratterizzati da complessi meccanismi d’azione che prevedono molteplici bersagli biomolecolari. Per caratterizzare il modo di azione di tali sostanze a livello cellulare è necessario integrare metodi di analisi sofisticati e ricchi di informazioni, quali alcuni consolidati metodi omici. Questo progetto di ricerca si baserà sull’analisi di dati trascrittomici, proteomici e metabolomici relativi al trattamento di cellule tumorali con composti metallici citotossici e punterà alla loro interpretazione in termini meccanicistici mediante avanzate metodologie bioinformatiche. Le ipotesi formulate saranno poi validate mediante specifici saggi cellulari e molecolari.

Referente scientifico: Prof. Luigi Messori

Cofinanziata su fondo MESSORI_AIRC_IG2021_ID26169 CUP B99J21023960007

Tematica 7: “Sintesi di glicomimetici per applicazioni come antibatterici e per la cura di malattie da misfolding proteico.”

Descrizione del progetto: Il progetto prevede lo studio di reazioni stereoselettive per la sintesi di glicomimetici azotati (ammino e/o imminozuccheri) a partire da zuccheri e da altri composti naturali. Lo studio si focalizzerà sulla sintesi di strutture mono- e bicicliche contenenti una funzionalità β -lattamica oppure catene lipofile per l’interazione selettiva con enzimi lisosomiali. I primi composti verranno testati come agenti antibatterici o antifungini, mentre i secondi saranno valutati in particolare come chaperoni e/o attivatori della glucocerebrosidasi, enzima coinvolto nelle patologie di Gaucher e Parkinson. Per entrambe le applicazioni saranno anche sviluppati derivati decorati con unità fotosensibili che permettono di innescare l’attività biologica al bisogno.

Referente scientifico: Prof. Francesca Cardona

Cofinanziata su fondi DICUS
GOTI PRIN 2010L9SH3K_006 CUP B11J12002450001
CARDONACRF20180942 CUP B94I18007230008 –
CARDONABANDOSALUTE2020 CUP G14I18000270002

	<p>TELETHON_GSA22P001_Clemente CUP B97G22000780007 PRIN2022_CARDONA CUP B53D23015580006 EROGAZIONE_liberaleAIG_Clemente e su fondo NEUROFARBA MORRONEAMMEC2019 CUP B54I19004090007 presso Dipartimento NEUROFARBA</p> <p>Tematica 8: “Nanoparticelle reattive incorporate in gel: nuovi strumenti per l'analisi di opere d'arte.”</p> <p>Descrizione del progetto: Lo studio di substrati complessi nel settore dei beni culturali e forense richiede soluzioni robuste e validate per identificare i componenti in tracce, i prodotti di degradazione e i biocontaminanti, contribuendo anche agli studi su provenienza e autenticazione delle opere d’arte. Saranno studiati nuovi compositi ibridi NPs@gel progettati per interagire selettivamente con le sostanze da analizzare. Essi saranno utilizzati come spugne per il campionamento degli analiti e/o per il rilascio di molecole attive, fotoluminescenti e/o con attività enzimatica. Dopo l'adsorbimento degli analiti, il materiale potrà essere stabilmente conservato senza perdere o alterare le sostanze chimiche adsorbite. Nello studio, saranno utilizzati sia idrogel che organogel come matrici attive.</p> <p>Referente scientifico: Prof. Rodorico Giorgi</p> <p>Cofinanziata su fondo PRIN2022_GIORGI CUP B53D23013630006 e in quota parte dal CSGI Consorzio Interuniversitario per lo Sviluppo dei Sistemi a grande interfase.</p> <p>Tematica 9: “Proteine target per farmaci antitumorali a base di platino ed oro: dalle interazioni molecolari alle applicazioni terapeutiche.”</p> <p>Descrizione del progetto: Il progetto multidisciplinare intende valutare il ruolo delle interazioni molecolari tra proteine target e farmaci citotossici ad attività antitumorale a base di Pt(II), Au(I) e Au(III), sia commerciali sia sintetizzati durante lo studio. Combinando spettrometria di massa, dicroismo circolare, spettroscopia Raman risonante ed assorbimento UV-vis, verranno studiati i complessi fra i farmaci e i) il citocromo c ed il suo complesso fisiologico con la cardiopolipina, direttamente coinvolti nel processo di apoptosi cellulare; ii) la sieralbumina umana, la proteina più abbondante nel plasma, come vettore di farmaci. La valutazione dell’attività biologica di complessi proteine/farmaci, selezionati sulla base dei risultati, rappresenta una potenziale opportunità per nuove applicazioni terapeutiche.</p> <p>Referente scientifico: Dott. Federico Sebastiani</p> <p>Cofinanziata su fondi BECUELIL13 - BECUCCICDR17 – MESSORI AIRC_IG2021_ID26169 CUP B99J21023960007</p>
<p>SOGGIORNO DI STUDIO E RICERCA ALL'ESTERO</p>	<p>6 mesi</p>
<p>DOCUMENTI RICHIESTI PER LA PARTECIPAZIONE AL CONCORSO (pena l'esclusione)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ● Copia documento di identità in corso di validità ● Autocertificazione per titoli di studio italiani (laurea triennale, laurea specialistica o magistrale o ciclo unico) con elenco degli esami sostenuti, crediti e relativa votazione, titolo della tesi e voto di laurea (utilizzando questo fac simile o modelli analoghi che riportino le informazioni richieste) ● Titoli di studio esteri (Bachelor’s e Master’s Degrees o combined cycle Degree) con elenco degli esami sostenuti, crediti e relativa votazione, scala di valutazione, titolo della tesi e voto di laurea

	<p><i>Analoga documentazione (ad esclusione del voto di laurea) deve essere presentata da coloro che conseguiranno il titolo entro il 31/10/2025</i></p>																	
ALLEGATI RICHIESTI PER LA VALUTAZIONE	<p>DOCUMENTI OBBLIGATORI</p> <ul style="list-style-type: none"> ● Curriculum vitae et studiorum inclusa un'autocertificazione dattiloscritta, che riporti per ogni corso di laurea triennale e magistrale o corso di laurea magistrale a ciclo unico o titoli equivalenti: la data di prima immatricolazione, gli esami sostenuti con relativo numero di crediti, media degli esami ponderata e aritmetica. ● Un Progetto di ricerca per OGNI borsa per cui il candidato intende concorrere e ogni progetto dovrà essere congruente con la tematica. Fino a 13 progetti. ● Titolo e abstract esteso della tesi di laurea (massimo 5 fogli formato A4) <p>DOCUMENTI FACOLTATIVI</p> <ul style="list-style-type: none"> ● Elenco delle pubblicazioni scientifiche ● Elenco degli eventuali ulteriori titoli inclusi periodi trascorsi in mobilità per studio e/o ricerca all'estero ● Fino a un massimo di due lettere di referenza 																	
INDICAZIONI RELATIVE AL/AI PROGETTO/I DI RICERCA	<p>Ogni progetto di ricerca deve essere redatto in lingua inglese in non più di 12.000 caratteri TOTALI inclusi spazi, <i>abstract</i> (non più di 500 caratteri inclusi spazi), introduzione, note e riferimenti bibliografici al fine di valutare l'attitudine del candidato alla ricerca.</p> <p>Il candidato può concorrere per più graduatorie allegando per ciascuna un distinto progetto (riportare chiaramente il riferimento alla tematica prescelta).</p>																	
PROVA ORALE	<p>In presenza (I candidati possono richiedere, nella domanda di partecipazione, lo svolgimento della prova a distanza)</p> <p>La prova orale può essere svolta in lingua inglese. Se sostenuta in lingua italiana, la prova orale prevedrà un accertamento della conoscenza della lingua inglese.</p>																	
MODALITA' DI VALUTAZIONE	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Parametro</th> <th>punteggio minimo</th> <th>punteggio massimo</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Curriculum vitae et studiorum, progetto di ricerca, pubblicazioni ed eventuali ulteriori titoli</td> <td>40/120</td> <td>60/120</td> </tr> <tr> <td colspan="3">Sono ammessi alla prova orale i candidati che hanno ottenuto il punteggio minimo di 40/120</td> </tr> <tr> <td>Prova orale: discussione del progetto di ricerca, delle pubblicazioni e degli eventuali ulteriori titoli</td> <td>40/120</td> <td>60/120</td> </tr> <tr> <td colspan="3" style="text-align: center;">L'idoneità è conseguita con il punteggio minimo di 80/120</td> </tr> </tbody> </table>			Parametro	punteggio minimo	punteggio massimo	Curriculum vitae et studiorum, progetto di ricerca, pubblicazioni ed eventuali ulteriori titoli	40/120	60/120	Sono ammessi alla prova orale i candidati che hanno ottenuto il punteggio minimo di 40/120			Prova orale: discussione del progetto di ricerca, delle pubblicazioni e degli eventuali ulteriori titoli	40/120	60/120	L'idoneità è conseguita con il punteggio minimo di 80/120		
Parametro	punteggio minimo	punteggio massimo																
Curriculum vitae et studiorum, progetto di ricerca, pubblicazioni ed eventuali ulteriori titoli	40/120	60/120																
Sono ammessi alla prova orale i candidati che hanno ottenuto il punteggio minimo di 40/120																		
Prova orale: discussione del progetto di ricerca, delle pubblicazioni e degli eventuali ulteriori titoli	40/120	60/120																
L'idoneità è conseguita con il punteggio minimo di 80/120																		
ULTERIORI INDICAZIONI RELATIVE ALLA VALUTAZIONE	<p>La prova orale verterà su ogni progetto di ricerca per cui i candidati concorrono e sulle conoscenze di base anche nell'ambito del progetto di ricerca e del lavoro di tesi di laurea triennale e/o magistrale o equivalente. Ogni progetto di ricerca</p>																	

	dovrà essere illustrato mediante una presentazione di massimo 8 slides. Inoltre i candidati potranno produrre una slide di presentazione del CV.
--	---

CALENDARIO			
	DATA	ORA	LUOGO
PROVA ORALE	16 luglio 2025	8:30	Biblioteca "Parrini" Via della Lastruccia, 13 Sesto Fiorentino (FI)
L'elenco degli ammessi alla prova orale e la graduatoria finale saranno pubblicati alla pagina Corsi dottorato di ricerca			