

ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

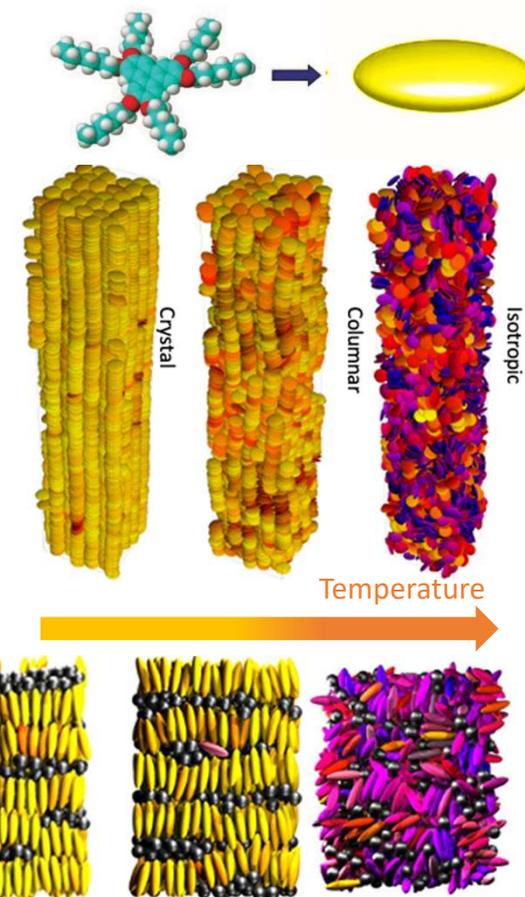
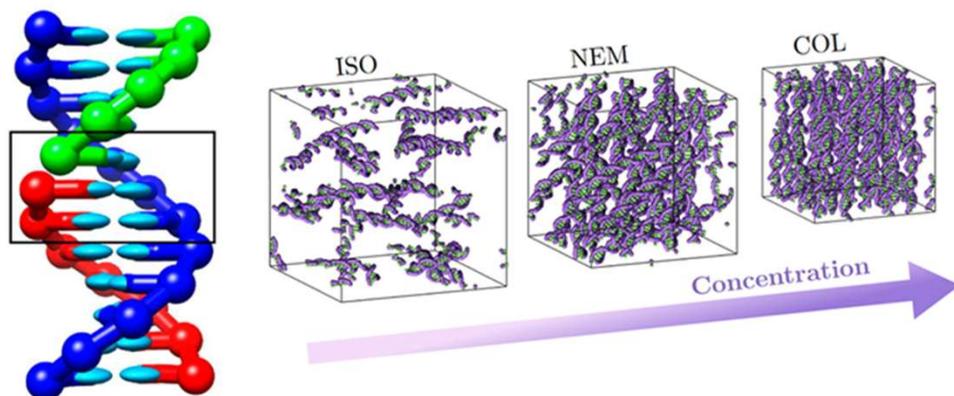
Area di Chimica Fisica

Dipartimento di Chimica Industriale «Toso Montanari»

Simulazioni di materiali «soffici» con modelli a scala molecolare

Le tesi disponibili riguardano lo studio del comportamento collettivo di **materiali soffici**, come **cristalli liquidi**, **liquidi ionici**, **oligomeri di DNA** e altri sistemi complessi, mediante simulazioni basate su modelli a scala molecolare.

L'attività si focalizzerà sull'analisi di fenomeni di **autoassemblaggio** e sulla formazione di **ordine orientazionale e posizionale**, caratteristiche chiave nell'organizzazione di questi sistemi su scala nano e mesoscopica.



Per informazioni:

s.orlandi@unibo.it, luca.muccioli@unibo.it

Publicazioni selezionate:

<https://doi.org/10.1039/C7SM02459B>

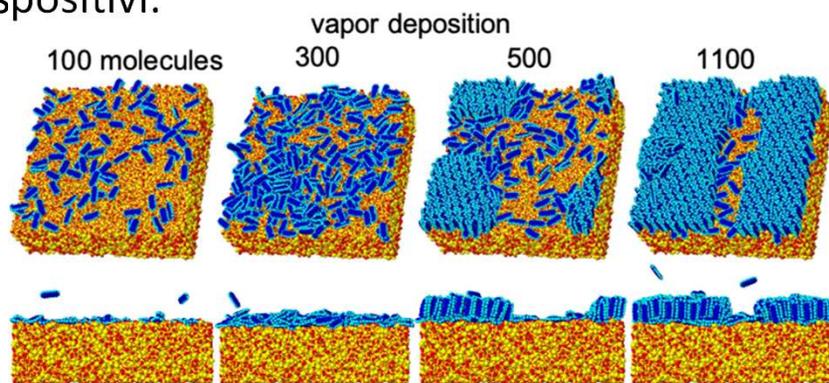
<https://doi.org/10.1039/C5CP05754J>

<https://doi.org/10.1021/acs.biomac.3c01435>

Simulazioni Molecular Dynamics di semiconduttori organici

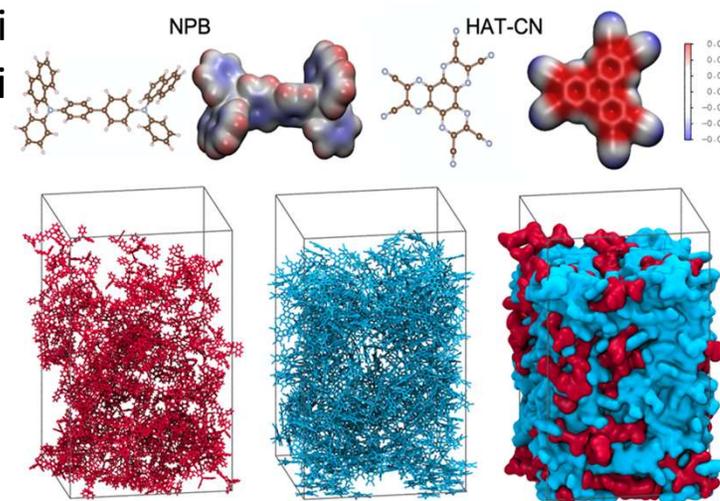
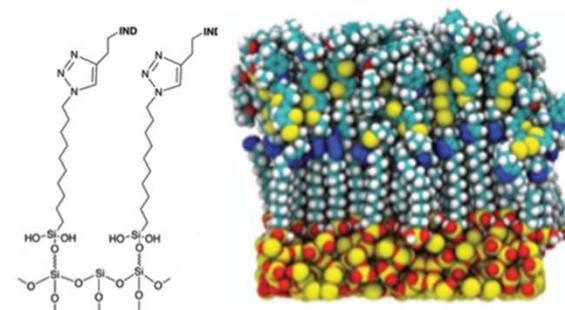
Le tesi disponibili riguardano lo studio, mediante simulazioni MD atomistiche, dei fenomeni fisici che influenzano il comportamento di **dispositivi di elettronica organica**, come **OLED** e **celle solari organiche**.

L'attività si concentrerà sull'analisi delle **proprietà elettroniche dei materiali**, dei meccanismi di **trasporto di carica**, e dell'**organizzazione molecolare**. Particolare attenzione sarà dedicata al **ruolo della morfologia** dei materiali attivi nella determinazione delle prestazioni dei dispositivi.



Per informazioni:

luca.muccioli@unibo.it, s.orlandi@unibo.it



Publicazioni selezionate:

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.8b03063>

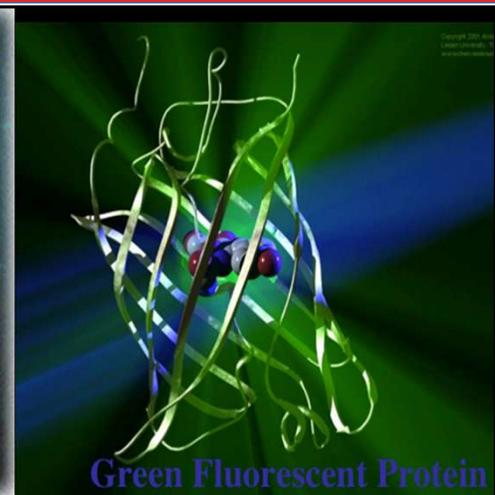
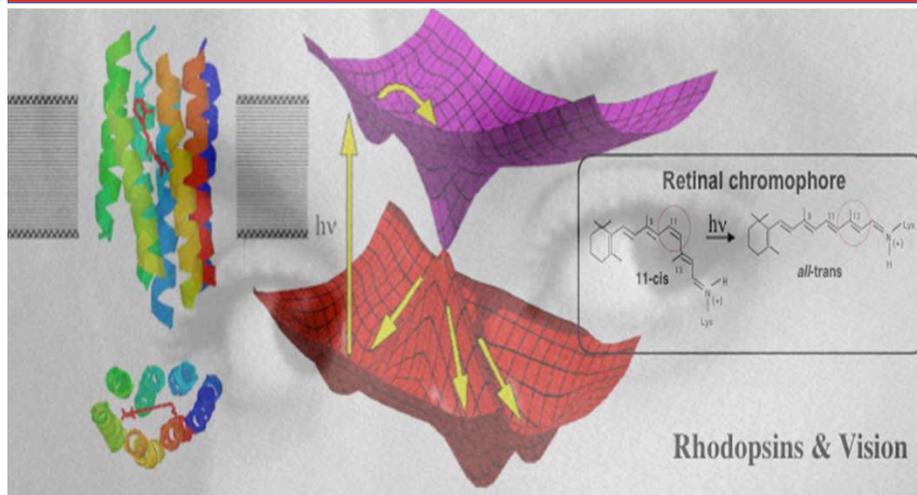
<https://doi.org/10.1002/adts.202300080>

<https://doi.org/10.1021/acs.accounts.2c00616>

Modellistica di processi fotoindotti e spettroscopici

Gruppo di ricerca: Fotochimica e spettroscopia computazionale

(Prof. Marco Garavelli)



Il lavoro di tesi si propone di modellare, attraverso tecniche computazionali avanzate, la fotochimica, fotofisica e spettroscopia di cromofori organici e biologici, nonchè di progettare materiali molecolari SMART fotoattivi per applicazioni in ICT e nanotecnologia.

[Per informazioni rivolgersi al Prof. Marco Garavelli](#)

marco.garavelli@unibo.it (www.unibo.it/docenti/marco.garavelli)

Chemical Science

PERSPECTIVE

View Article Online
View Journal | View Issue

Check for updates

Two-dimensional UV spectroscopy: a new insight into the structure and dynamics of biomolecules

Cite this: *Chem. Sci.*, 2019, 10, 9907

J|A|C|S

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Ultrafast Spectroscopy: State of the Art and Open Challenges

Cite This: *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142, 3–15

perspective
pubs.acs.org/JACS

CHEMICAL REVIEWS

Quantum Chemical Modeling of the Photoinduced Activity of Multichromophoric Biosystems

Focus Review

Cite This: *Chem. Rev.* 2019, 119, 9361–9380

pubs.acs.org/CR

Disponibili sia tesi Triennali che Magistrali

Disponibili Dottorati di Ricerca

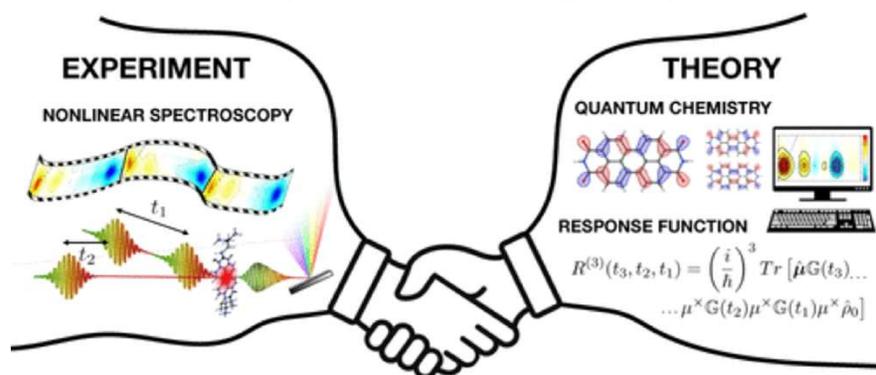
Spettroscopia e controllo di processi fotoindotti: IR → X-ray

Prof. Francesco Segatta

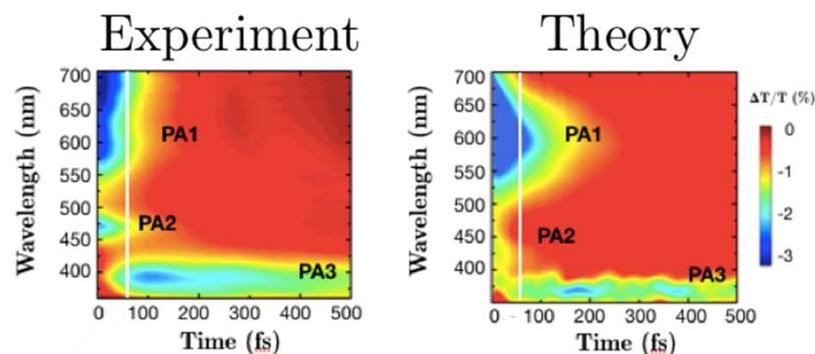
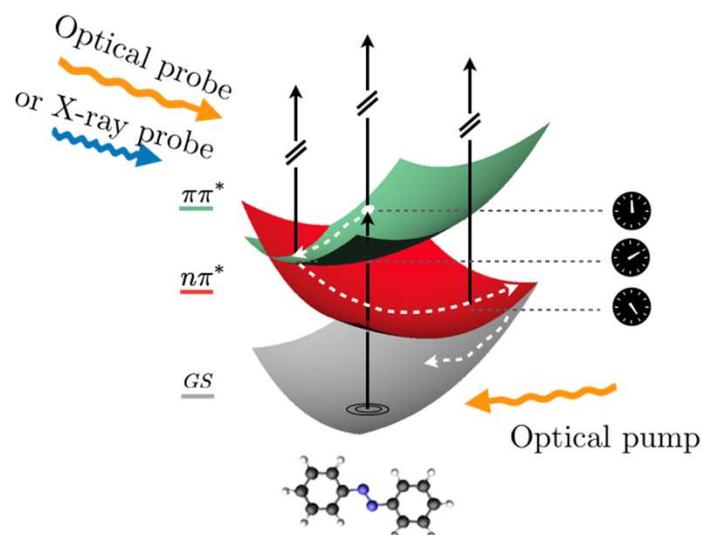
Il lavoro di tesi porterà ad apprendere ed applicare i metodi di **simulazione della spettroscopia** risolta nel tempo di sistemi molecolari in fase gas / condensata, in un ampio range spettrale (IR, Vis/UV, X-ray).

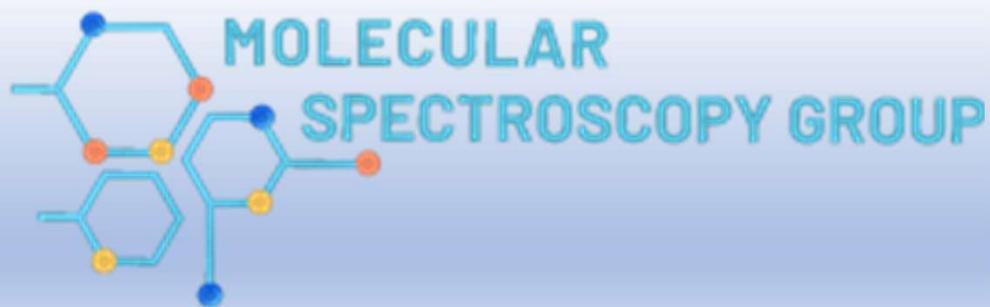
Permetterà (aspetto più importante) di **imparare un metodo** per l'affronto teorico/computazionale di problemi chimico fisici.

... tenendo sempre d'occhio gli esperimenti!



Per informazioni: francesco.segatta@unibo.it
(www.unibo.it/docenti/francesco.segatta)





Il gruppo di Spettroscopia Molecolare concentra la sua attività su indagini spettroscopiche, impiegando un'ampia gamma di metodi sperimentali e computazionali. <https://site.unibo.it/msg/>

Proff. Tommaso Salzillo e Elisabetta Venuti

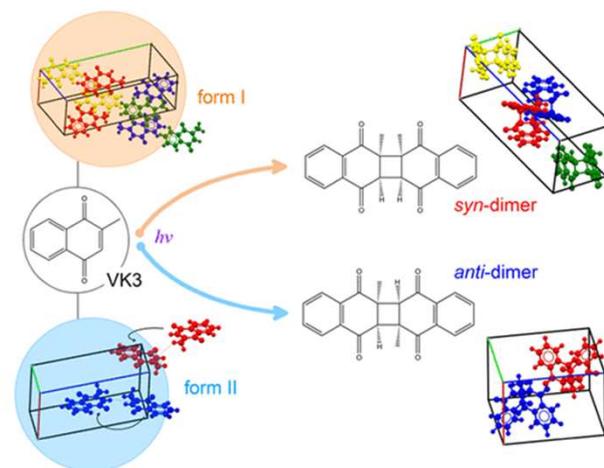
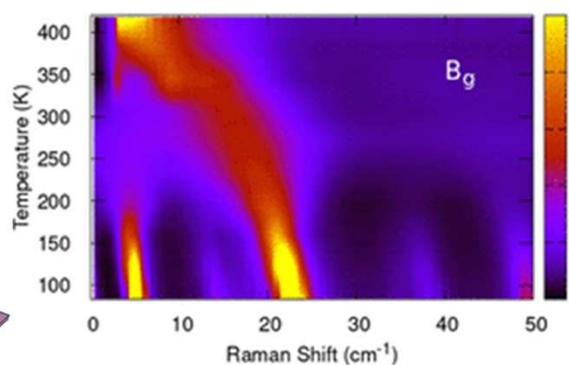
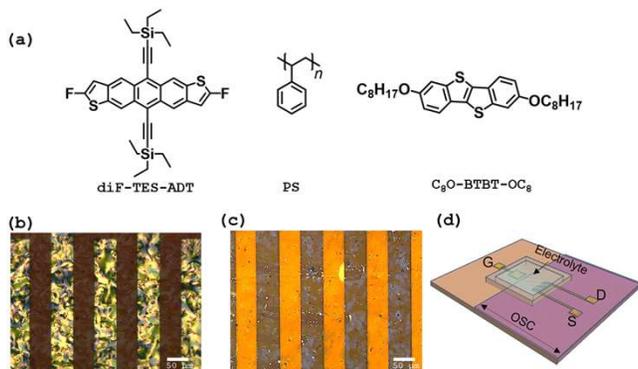
Proposte di Tesi – Spettroscopia Molecolare di fasi condensate e Materiali Funzionali

Vibrazioni e Transizioni nei Materiali Molecolari Scopri cosa rivelano le vibrazioni a bassa frequenza su semiconduttori organici, polimeri e farmaci, grazie a spettroscopie THz-Raman e IR ad alta risoluzione.

Imaging Ottico e Difetti nei Materiali Funzionali Studia perovskiti e altri materiali avanzati con tecniche di micro-fotoluminescenza. Mappa difetti locali ed effetti ottici in situ per applicazioni optoelettroniche.

Microplastiche: Analisi Spettroscopica di un Inquinante Emergente Analizza microplastiche in matrici ambientali e biologiche usando spettroscopie vibrazionali e ottiche.

Luce e Reazioni nei Solidi Organici Esplora come la luce attiva reazioni nei cristalli organici. Usa la spettroscopia per capire i meccanismi alla base di questi processi.



Studio e caratterizzazione di micro e nano-plastiche tramite tecniche di microspettroscopia e microscopia a scansione elettronica in collaborazione con gruppi di ricerca del policlinico Sant'Orsola

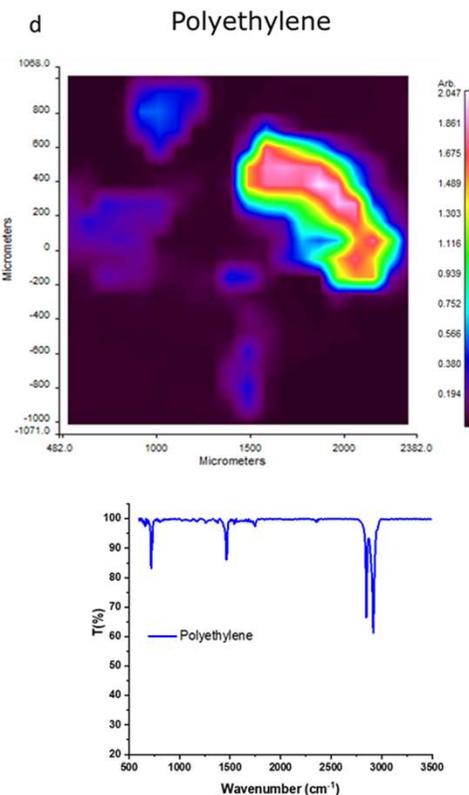
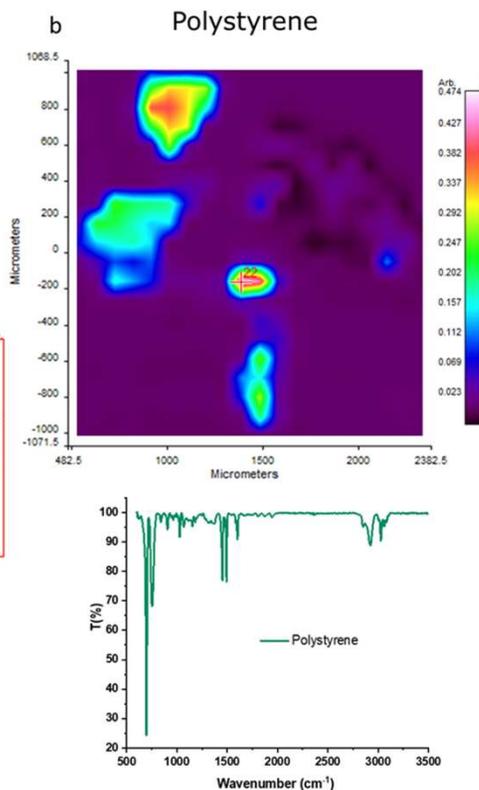
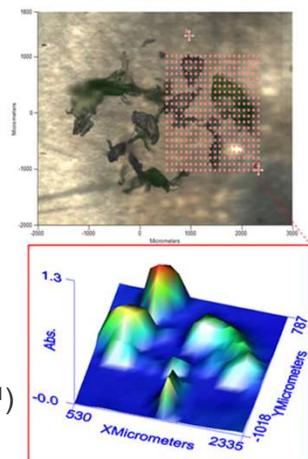


Environmental microplastics characterization by micro FTIR mapping

Micro-FTIR PerkinElmer Spectrum III dual range + spotlight 200i

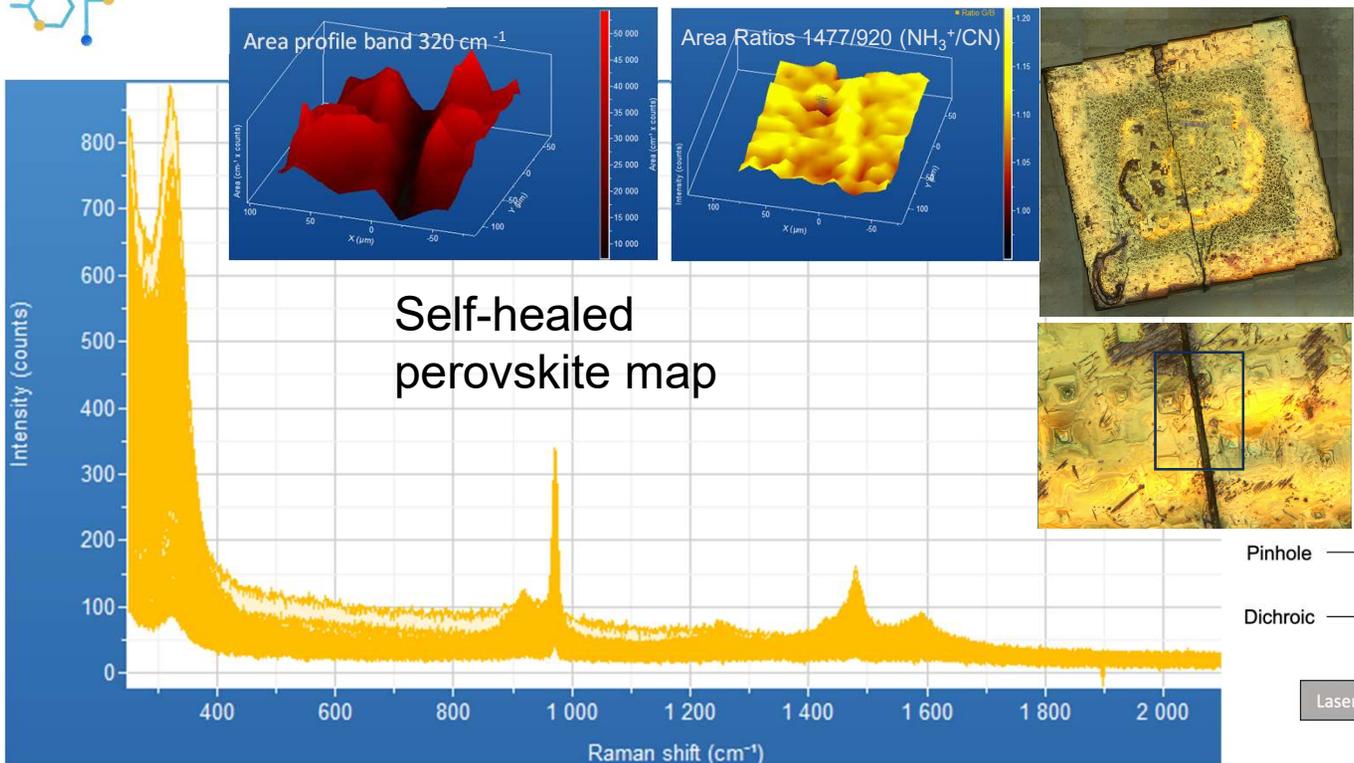


- Far- and Mid-Infrared (30 -8300 cm^{-1})
- Spectral resolution up to 2 cm^{-1}
- Micro-ATR Tip: $\varnothing 100 \mu\text{m}$
- Maximum spatial resolution of ca $10 \mu\text{m}$.

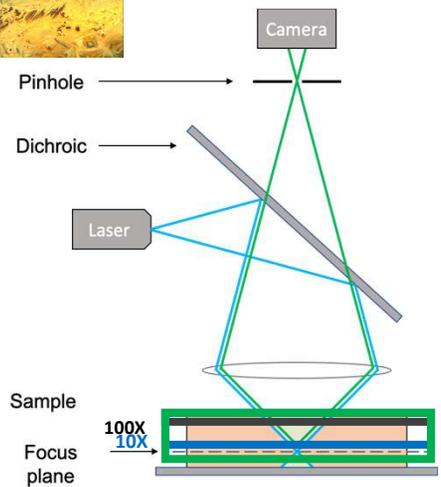
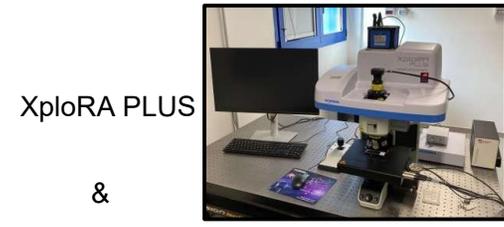


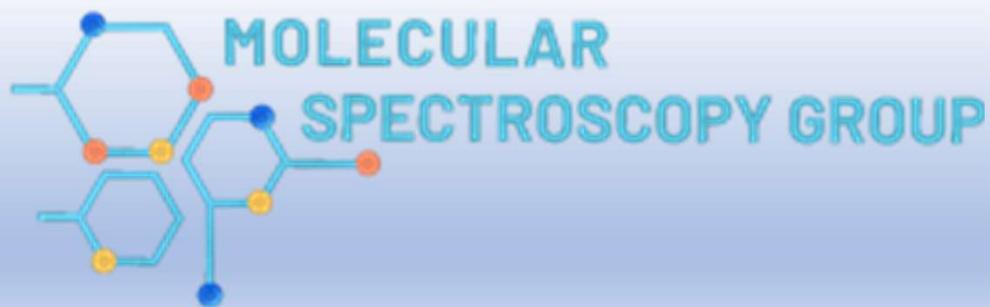
Studio del processo di self-healing in perovskites tramite Raman mapping nel range del terahertz.

Progetto in collaborazione con Prof. Pance Naumov - New York University Abu Dhabi (NYUAD)



Obj	N.A.	Spot Lasers (μm) 532, 785 nm	aperture angle (°)	Δz depth (μm) 532, 785 nm
5x	0.1	6.5, 9.6	5.7	37.3, 55.0
10x	0.25	2.6, 3.8	14.5	6.0, 8.8
20x	0.35	1.9, 2.7	20.5	3.0, 4.5
50x	0.35	1.9, 2.7	20.5	3.0, 4.5
100x	0.9	0.72, 1.06	64.2	0.5, 0.7





Il gruppo di Spettroscopia Molecolare concentra la sua attività su indagini spettroscopiche, impiegando un'ampia gamma di metodi sperimentali e computazionali. <https://site.unibo.it/msg/>

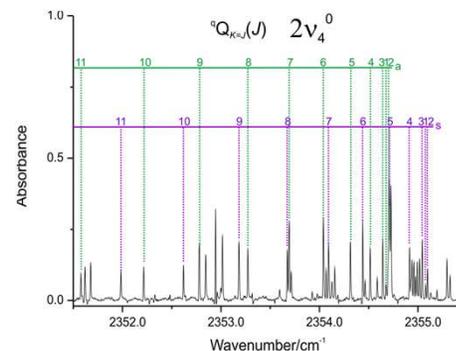
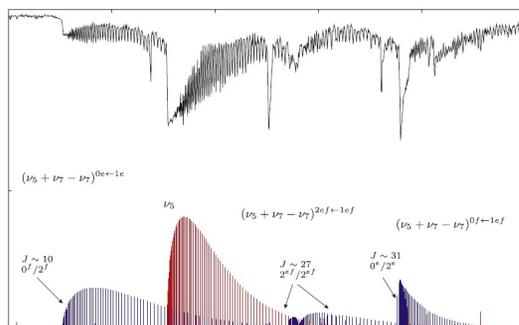
Prof. Filippo Tamassia

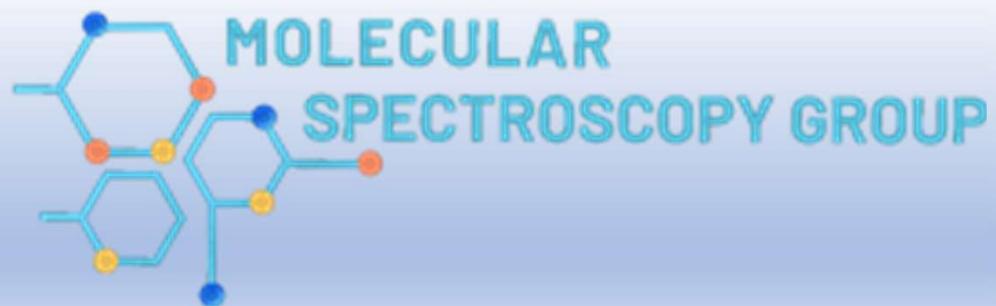
Proposte di Tesi – Spettroscopia Vibro-rotazionale e rotazionale in collaborazione con il Dipartimento di Chimica «Ciamician» dell'Università di Bologna e con il Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi dell'Università Cà Foscari di Venezia.

Registrazione e analisi di spettri vibro-rotazionali (infrarossi) e rotazionali (onde millimetriche e lontano infrarosso) di molecole di interesse astrochimico e atmosferico.

Il nostro laboratorio ha una lunga esperienza relativa allo studio spettroscopico sperimentale di molecole di interesse astrochimico, come acetilene, cianoacetilene, ammoniaca e le loro varianti istopicamente sostituite. L'analisi degli spettri consente di identificare le molecole di interesse in ambienti complessi come le atmosfere planetarie e le regioni dello spazio interstellare.

Per lo stesso motivo, la conoscenza dettagliata degli spettri di metani ed etani contenenti alogeni, ampiamente indagati nel nostro laboratorio negli anni scorsi, consente uno studio qualitativo e quantitativo della composizione dell'atmosfera.





Contatti:

Prof.ssa Elisabetta Venuti

Prof. Filippo Tamassia

Prof. Tommaso Salzill

Sito web: <https://site.unibo.it/msg/>

Modelli multiscala di catalizzatori eterogenei

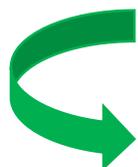
I progetti proposti riguardano lo studio dei meccanismi di attivazione e conversione di piccole molecole e composti da biomassa attraverso:

 Termocatalisi

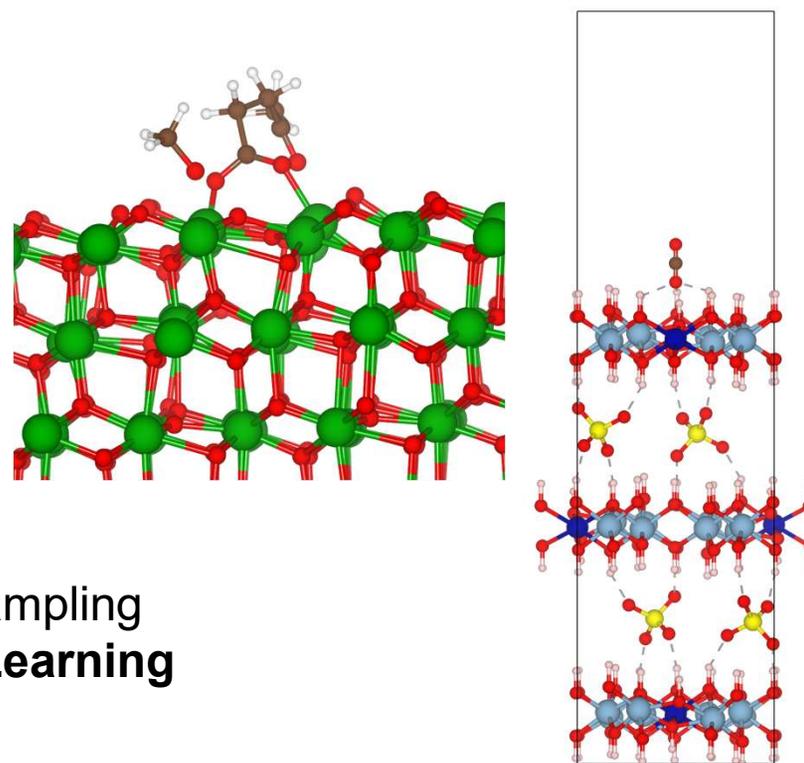
 Elettrocatalisi

La nostra “cassetta degli attrezzi”:

- DFT periodico
- Grand Canonical DFT
- Dinamica molecolare ed enhanced sampling
- Sviluppo e applicazione di **Machine Learning Interatomic potential**



Simulare le reazioni catalitiche
in condizioni *operando*!

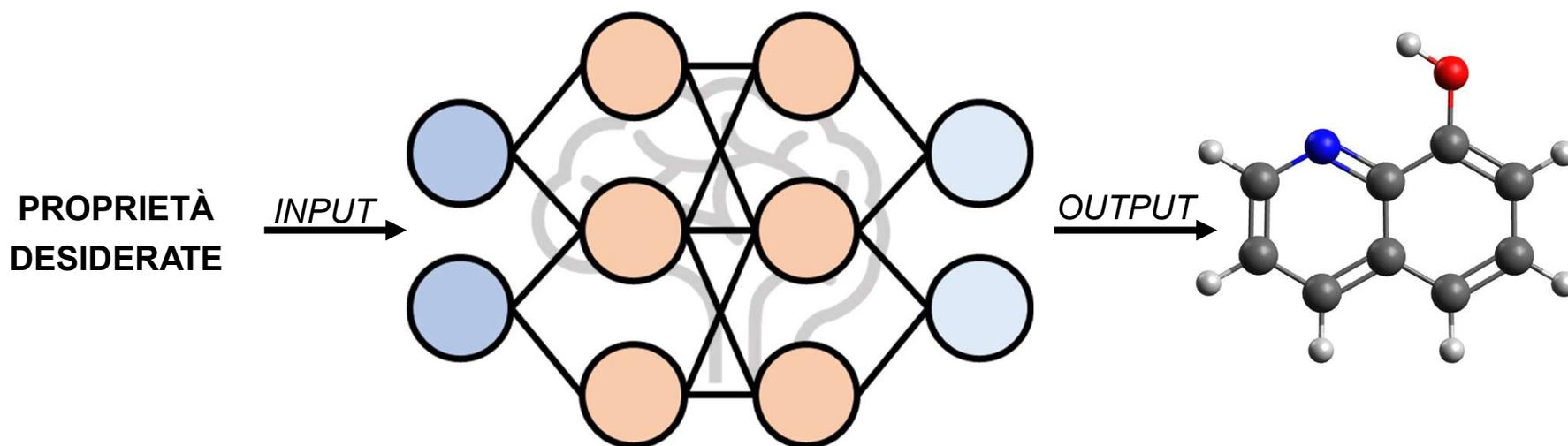


**collaborazione con gruppi di
ricerca sperimentali:**
Possibilità di tesi teorico-sperimentali

AI per il design molecolare

I progetti proposti riguardano l'**applicazione** e lo **sviluppo** di **software machine learning** e **intelligenza artificiale** per il design molecolare.

Si definisce una proprietà desiderata, e il software restituisce candidati *molecolari*:



I progetti generalmente prevedono **collaborazioni** con gruppi sperimentali **per eseguire la sintesi delle molecole** generate dai software AI. Possibilità di tesi teorico-sperimentali.

