

**Allegato 1**

Bando di concorso per l'attribuzione di 1 assegno per lo svolgimento di attività di ricerca presso l'Università degli Studi di Udine dal tema "Caratterizzazione dell'attività di enzimi in deep eutectic solvents" SSD: PHYS-04A (responsabile scientifico, Paolo Giannozzi)

Art. 1

È indetta una selezione per l'attribuzione di 1 assegno presso l'Università degli Studi di Udine per lo svolgimento dell'attività di ricerca individuabile nell'Allegato A che costituisce parte integrante e sostanziale del presente bando.

L'assegno di ricerca è collegato al progetto di ricerca sul quale grava ed è subordinato alla relativa copertura finanziaria.

L'assegno può essere rinnovato con il vincitore in conformità con quanto previsto dall'art. 22 della Legge 30 dicembre 2010, n. 240 (nel testo previgente al D.L. 30 aprile 2022, n. 36, convertito con modificazioni dalla L. 29 giugno 2022, n. 79) e dal Regolamento dell'Università degli Studi di Udine per il conferimento di assegni di ricerca emanato con Decreto rettorale 31 marzo 2021, n. 182, in presenza di valutazione positiva del responsabile scientifico sull'attività svolta dall'assegnista, adeguata motivazione scientifica e relativa copertura finanziaria, nei limiti di quanto stabilito al successivo art. 3, lett. b) e c).

L'assegno di ricerca non attribuisce al vincitore alcun diritto in ordine all'accesso ai ruoli dell'Università.

Eventuali comunicazioni personali ai candidati relative alla presente selezione saranno trasmesse esclusivamente all'indirizzo di posta elettronica indicato in sede di iscrizione alla selezione.

Art. 2

Le attività oggetto dell'assegno di ricerca di cui al presente bando di concorso ed i requisiti di ammissione sono indicati e descritti nell'Allegato A. La mancanza dei requisiti di ammissione al momento della presentazione della domanda comporta l'**esclusione** del candidato dalla selezione.

Il possesso del titolo di dottore di ricerca o titolo equivalente conseguito all'estero o, per i soli settori interessati, del titolo di specializzazione di area medica corredato da un'adeguata produzione scientifica, costituisce requisito preferenziale ai fini dell'attribuzione dell'assegno oggetto della presente selezione, qualora non sia stato previsto quale requisito di ammissione.

La Commissione giudicatrice valuta, ai fini della sola ammissione al concorso, l'idoneità del titolo di studio conseguito all'estero fatta salva la valutazione del titolo di specializzazione di area medica a cui si applica l'art. 38, comma 3.1, del D. Lgs 165/2001 e successive modifiche e integrazioni e la normativa comunitaria in materia.

La Commissione procede alla valutazione del titolo di studio conseguito all'estero in base alla relativa documentazione allegata alla domanda di partecipazione alla selezione e può escludere il candidato qualora la documentazione presentata non fornisca elementi sufficienti per la valutazione.

I candidati sono invitati pertanto ad allegare tutta la documentazione in loro possesso relativa al proprio titolo al fine di fornire alla Commissione elementi sufficienti per la valutazione della propria posizione.



I candidati sono ammessi alla selezione con riserva e la loro esclusione, per difetto dei requisiti prescritti, può essere disposta in qualsiasi momento con motivato provvedimento.

Art. 3

L'assegno di ricerca di cui al presente bando non può essere conferito:

- a) ai dipendenti delle Università e ai soggetti di cui all'art. 22, comma 1, della Legge 30 dicembre 2010, n. 240 (nel testo previgente al D.L. 30 aprile 2022, n. 36, convertito con modificazioni dalla L. 29 giugno 2022, n. 79);
- b) a coloro che hanno già usufruito di assegni di ricerca ex Legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il periodo massimo consentito dalla normativa, ad esclusione del periodo in cui l'assegno è stato fruito in coincidenza con il dottorato di ricerca, nel limite massimo della durata legale del relativo corso;
- c) a coloro che hanno già usufruito di assegni di ricerca e di contratti di ricercatore a tempo determinato ex Legge 30 dicembre 2010, n. 240 per complessivi 12 anni anche non continuativi;
- d) a coloro che hanno un grado di parentela o di affinità, fino al quarto grado compreso, con:
 - il Rettore, il Direttore Generale o un componente del Consiglio di Amministrazione dell'Università degli Studi di Udine;
 - il responsabile scientifico o un professore/ricercatore appartenente al dipartimento o alla struttura d'interesse sede dell'attività dell'assegno di ricerca.

L'assegno di ricerca di cui al presente bando non può essere cumulato:

- a) con borse di studio a qualsiasi titolo conferite, tranne che con quelle concesse da istituzioni nazionali o straniere utili ad integrare, con soggiorni all'estero, l'attività di formazione o di ricerca dell'assegnista;
- b) con altri assegni di ricerca;
- c) con rapporti di lavoro dipendente ancorché in regime di *part time*, fatto salvo quanto previsto dalla normativa per i dipendenti di pubbliche amministrazioni.

La titolarità dell'assegno di cui al presente bando è inoltre incompatibile con la contemporanea frequenza di corsi di laurea, laurea magistrale, dottorato di ricerca con borsa e specializzazione medica, in Italia e all'estero.

Non possono accedere alla selezione coloro i quali abbiano riportato condanne penali che abbiano comportato, quale sanzione accessoria, l'interdizione dai pubblici uffici ovvero l'incapacità di contrarre con la pubblica amministrazione.

Art. 4

I candidati devono presentare, con le modalità descritte nel successivo art. 5, apposita domanda di partecipazione alla selezione, debitamente sottoscritta in modalità autografa o digitale. La domanda priva di sottoscrizione comporterà l'**esclusione** del candidato, tranne nel caso di accesso mediante utilizzo di Sistema Pubblico di Identità Digitale (SPID) nel qual caso la sottoscrizione non sarà necessaria.

La domanda di partecipazione dovrà essere caricata nella sua interezza (vale a dire in ogni sua pagina) **pena esclusione** del candidato alla selezione.

Alla domanda di partecipazione alla selezione, i candidati dovranno allegare **a pena di esclusione**:

1. il *curriculum* scientifico professionale in lingua italiana o inglese o nell'eventuale ulteriore lingua indicata nell'Allegato A, dove siano evidenziate le attitudini del candidato idonee allo svolgimento e alla realizzazione del programma della ricerca;
2. copia del documento di identità o di altro documento di identificazione in corso di validità. I cittadini di Stati non appartenenti all'Unione Europea dovranno obbligatoriamente allegare copia del passaporto;
3. limitatamente ai cittadini di Stati non appartenenti all'Unione Europea soggiornanti o autorizzati a soggiornare in Italia, copia del permesso di soggiorno o dell'autorizzazione a soggiornare in Italia;



4. per i candidati che non possono autocertificare alle condizioni di seguito riportate, la documentazione attestante il possesso del titolo accademico previsto per l'ammissione alla selezione. L'eventuale possesso di un titolo accademico superiore non esonera il candidato dal produrre tale documentazione che, se mancante, comporterà la sua esclusione:
- **I candidati cittadini italiani o di uno Stato appartenente all'Unione Europea** dovranno presentare una dichiarazione sostitutiva di certificazione e eventualmente di atto notorio relativamente al possesso del titolo accademico previsto per l'ammissione (con indicazione del titolo accademico, istituzione accademica erogante, anno di conseguimento, votazione conseguita) e alle pubblicazioni e altri titoli posseduti, indicando per ciascuno di essi tutti gli elementi identificativi necessari alla valutazione da parte della Commissione. **La domanda di partecipazione vale quale dichiarazione sostitutiva di certificazione del titolo accademico dichiarato.** Qualora l'oggetto della dichiarazione sostitutiva non risulti ben identificato per la natura, la durata, la collocazione temporale e per l'ente interessato, la Commissione esaminatrice non ne terrà conto. L'Amministrazione si riserva la facoltà di procedere ad idonei controlli circa la veridicità del contenuto delle dichiarazioni rese; in caso di falsa dichiarazione sono applicabili le disposizioni previste dall'art. 76 del D.P.R. n. 445/2000 e dagli artt. 483, 485, e 486 del codice penale. L'Università non terrà conto di eventuali certificati allegati da candidati cittadini italiani o di uno Stato appartenente all'Unione Europea.
 - **I cittadini di uno Stato non appartenente all'Unione Europea** dovranno presentare documenti e titoli in lingua italiana o inglese o nell'eventuale ulteriore lingua indicata nell'Allegato A, pena l'esclusione dalla selezione o, a seconda del caso, la loro mancata valutazione.
I documenti e i titoli, originariamente in lingua diversa, devono essere accompagnati da una traduzione, effettuata dal candidato sotto la sua responsabilità, in italiano o in inglese o nell'eventuale ulteriore lingua indicata nell'Allegato A. Con riferimento alla sola tesi, la traduzione può limitarsi ad un *abstract* esteso.
 - **I cittadini di uno Stato non appartenente all'Unione Europea regolarmente soggiornanti in Italia** possono utilizzare le dichiarazioni sostitutive di certificazione solo relativamente a stati, qualità personali o fatti certificabili o attestabili da soggetti pubblici italiani, fatte salve le speciali disposizioni contenute nelle leggi e nei regolamenti concernenti la disciplina dell'immigrazione e la condizione dello straniero.
 - **I cittadini di Stati non appartenenti all'Unione Europea autorizzati a soggiornare in Italia** possono utilizzare le predette dichiarazioni sostitutive nei casi in cui la produzione delle stesse avvenga in applicazione di convenzioni internazionali fra l'Italia ed il Paese di provenienza del dichiarante.

I candidati potranno inoltre allegare alla domanda di partecipazione ai fini valutativi le pubblicazioni e ogni altro titolo ritenuto utile a comprovare la propria qualificazione in relazione al programma di ricerca descritto nell'Allegato A e ad attestare l'eventuale attività di ricerca svolta presso soggetti pubblici e/o privati (con indicazione della decorrenza e durata). Le modalità di presentazione sono analoghe a quelle indicate al punto 4 del precedente paragrafo.

Vengono valutati solo i titoli posseduti dal candidato alla data di presentazione della domanda di selezione e presentati secondo le modalità di cui all'art. 5.

L'eventuale esclusione dalla procedura selettiva per mancanza dei requisiti di ammissibilità, per assenza dei documenti obbligatori, per mancata sottoscrizione della domanda di partecipazione alla selezione o per presentazione della domanda stessa con modalità diverse da quella prevista dal presente bando sarà comunicata agli interessati esclusivamente mediante messaggio di posta elettronica all'indirizzo e-mail indicato nella domanda di partecipazione alla selezione.



Art. 5

Le iscrizioni alla presente selezione inizieranno il 25 luglio 2024 ore 14:00 (ora italiana) e termineranno il 3 settembre 2024 ore 14:00 (ora italiana).

La domanda di partecipazione alla selezione deve essere compilata, pena esclusione, utilizzando l'apposita procedura *online*, disponibile all'indirizzo web: <https://pica.cineca.it/>.

Per coloro che non hanno già un'utenza, la procedura prevede una fase di registrazione del candidato, e una fase successiva di compilazione *online* della domanda.

Una volta completata, la domanda deve essere sottoscritta con le modalità (firma autografa, con allegato documento di identità, o firma digitale) descritte nella procedura *online*, a pena di esclusione dalla selezione. La domanda non dovrà essere firmata qualora si acceda alla procedura *online* sopraccitata mediante utilizzo di Sistema Pubblico di Identità Digitale (SPID). In caso di sottoscrizione con modalità autografa, il candidato dovrà caricare la domanda a sistema nella sua interezza. Le informazioni inserite nella domanda di partecipazione hanno valore di dichiarazione sostitutiva di certificazione e di atto di notorietà, ai sensi degli art. 46 e 47 del D.P.R. n. 445/2000.

Alla domanda di partecipazione alla selezione devono essere allegati in formato .pdf i titoli di cui all'art. 4. I singoli file, in formato .pdf, non possono avere dimensione superiore a 30MB.

Non è consentito presentare gli allegati alla domanda sotto forma di *link* a *file* residenti su servizi di "storage/file sharing on-line" o pagine *web*. Non è consentito il riferimento a documenti o pubblicazioni presentati presso questa od altre amministrazioni o a documenti allegati alla domanda di partecipazione ad altra procedura selettiva.

La domanda di partecipazione alla selezione viene inviata automaticamente all'Università degli Studi di Udine con la chiusura definitiva della procedura *online*.

L'Amministrazione universitaria:

- non si assume alcuna responsabilità nel caso sia impossibile leggere la documentazione presentata in formato elettronico a causa di file danneggiati;
- non accetta né prende in considerazione titoli o documenti pervenuti in formato cartaceo o con modalità diversa da quella indicata nel presente articolo.

L'Amministrazione non si assume alcuna responsabilità per il caso di errata indicazione, da parte del candidato, del proprio indirizzo di posta elettronica oppure in caso di mancata o tardiva comunicazione del cambiamento dell'indirizzo di posta elettronica indicato nella domanda, né per eventuali disguidi telematici imputabili a fatto di terzi, a caso fortuito o forza maggiore.

I candidati sono invitati a non attendere gli ultimi giorni prima della data di scadenza per la presentazione della domanda di partecipazione alla selezione. L'Università non si assume alcuna responsabilità per eventuali malfunzionamenti dovuti a problemi tecnici e/o sovraccarico della linea di comunicazione e/o dei sistemi applicativi.



Art. 6

La prova di selezione si svolge secondo le modalità riportate nell'Allegato A.

La prova tenderà ad accertare la preparazione, l'esperienza e l'attitudine alla ricerca dei candidati. Essa consisterà nella valutazione del *curriculum* scientifico professionale, delle pubblicazioni e dei titoli presentati, e del colloquio, ove previsto.

La mancata presentazione del candidato al colloquio sarà considerata come rinuncia alla selezione, qualunque ne sia la causa.

I candidati che intendono avvalersi, in relazione alla propria situazione di *handicap*, dei benefici di cui all'art. 20 della legge n. 104 del 1992 (necessità di ausilio, eventuale utilizzo di tempi aggiuntivi per l'espletamento delle prove d'esame), devono dichiararlo e corredare la domanda con idonea certificazione medica al fine di consentire all'Amministrazione di predisporre per tempo i mezzi e gli strumenti atti a garantire i benefici previsti; la mancata presentazione della certificazione medica esonera l'Amministrazione da ogni incombenza in merito.

Art. 7

La Commissione giudicatrice di concorso è individuata nell'Allegato A al presente bando di cui fa parte integrante.

La Commissione, nella prima seduta, nomina al proprio interno il Presidente ed il Segretario verbalizzante e stabilisce i criteri e le modalità di valutazione dei titoli e del colloquio, ove previsto.

I risultati della valutazione dei titoli devono essere resi noti agli interessati nel corso del colloquio, ove previsto.

La Commissione dispone di un numero complessivo di 100 punti (cento centesimi) attribuibili alla selezione. Al termine dei lavori la Commissione formula la graduatoria generale di merito sulla base del punteggio complessivo riportato da ogni candidato e provvede alla stesura del verbale delle operazioni concorsuali.

L'assegno è attribuibile, nel rispetto della graduatoria, ai candidati che abbiano riportato la votazione minima complessiva di 70/100 (settanta centesimi).

Il giudizio della Commissione è insindacabile nel merito.

La graduatoria sarà resa pubblica esclusivamente mediante pubblicazione all'albo ufficiale dell'Ateneo; l'esito della valutazione non sarà oggetto di comunicazione personale ai candidati.

Decadono dal diritto all'attribuzione dell'assegno di ricerca coloro che non dichiarano di accettarlo e non si presentano presso la struttura sede dell'attività di ricerca per la sottoscrizione del contratto entro i termini comunicati dalla stessa via posta elettronica all'indirizzo e-mail indicato dal candidato nella domanda, salvo ragioni di salute o cause di forza maggiore debitamente documentate e tempestivamente segnalate.

I candidati in possesso di titoli di studio conseguiti all'estero, se vincitori, devono presentare, qualora non già allegati alla domanda di partecipazione alla selezione:

- **Per i titoli di studio rilasciati da un paese aderente alla Convenzione di Lisbona (<https://www.enic-naric.net/>), la seguente documentazione:**
 - Diploma *Supplement* o analogha attestazione in inglese rilasciata dall'Università competente;
 - "Attestato di verifica del titolo estero - CIMEA" rilasciato da CIMEA (Centro di Informazione sulla Mobilità e le Equivalenze Accademiche) tramite il servizio «*diplome*» all'indirizzo <https://cimea.diplo-me.eu/udine/#/auth/login>



- **Per i titoli di studio rilasciati da un paese non aderente alla Convenzione di Lisbona (<https://www.enic-naric.net/>), una delle seguenti opzioni:**
 - Dichiarazione di valore in loco del titolo posseduto e il certificato relativo al titolo con esami e votazioni. Il certificato in lingua diversa dall'italiano o dall'inglese deve essere accompagnato da traduzione ufficiale in una di tali lingue (certificata dall'autorità diplomatico-consolare competente o asseverata presso un tribunale in Italia);
 - "Attestato di comparabilità e verifica del titolo estero - CIMEA" rilasciato da CIMEA (Centro di Informazione sulla Mobilità e le Equivalenze Accademiche) tramite il servizio «diplome» all'indirizzo <https://cimea.diplo-me.eu/udine/#/auth/login>

Se la documentazione sopraccitata non è disponibile in sede di stipula del contratto, il candidato deve dimostrare di averne fatto richiesta e presentarla non appena possibile; in caso di mancata consegna entro 6 mesi dall'inizio dell'assegno, il candidato decadrà dallo stesso e sarà tenuto alla restituzione delle somme finora percepite a tale titolo.

Art. 8

L'attività di ricerca non può essere iniziata prima della sottoscrizione del contratto che definisce le modalità della collaborazione.

L'attività oggetto dell'assegno di ricerca dovrà presentare le seguenti caratteristiche:

- a) svolgersi nell'ambito del programma di ricerca oggetto dell'assegno e non esserne supporto meramente tecnico;
- b) stretto legame con la realizzazione del programma di ricerca che costituisce l'oggetto del rapporto con il vincitore;
- c) carattere continuativo e comunque temporalmente definito, non meramente occasionale, ed in rapporto di coordinamento rispetto alla complessiva attività dell'Ateneo;
- d) svolgimento in condizione di autonomia, nei soli limiti del programma predisposto dal Responsabile dello stesso, senza orario di lavoro predeterminato.

L'assegnista è tenuto a presentare, con le scadenze previste dal contratto, alla struttura di riferimento, una particolareggiata relazione scritta sull'attività svolta e sui risultati conseguiti, corredata dal parere del responsabile scientifico. L'assegnista dovrà inoltre consegnare relazioni intermedie e *timesheet*, qualora richiesti dalla struttura di riferimento e/o dal responsabile scientifico.

L'assegnista è tenuto alla massima riservatezza circa i dati e le informazioni cui venga a conoscenza nel corso dello svolgimento dell'attività di ricerca. Su richiesta del responsabile scientifico sarà tenuto alla sottoscrizione di apposito accordo di riservatezza.

I diritti di proprietà industriale sui risultati conseguiti dall'assegnista nell'esecuzione dell'attività di ricerca appartengono in via esclusiva all'Università, fermo restando il diritto morale dell'assegnista ad essere riconosciuto autore o inventore.

L'Università si riserva la facoltà di revocare il presente bando di selezione per sopravvenuti motivi di interesse pubblico, qualora venga meno il progetto di ricerca e/o la copertura finanziaria su cui grava l'assegno di ricerca. Nel caso tali cause sopravvengano successivamente alla sottoscrizione del contratto, l'Università potrà recedere senza preavviso dallo stesso.



Art. 9

All'assegno di cui al presente bando, si applicano:

- in materia fiscale le disposizioni di cui all'art. 4 della Legge 13 agosto 1984, n. 476 e successive modificazioni e integrazioni;
- in materia previdenziale, le disposizioni di cui all'art. 2 commi 26 e seguenti della Legge 8 agosto 1995, n. 335 e successive modificazioni e integrazioni;
- in materia di congedo obbligatorio per maternità le disposizioni di cui al Decreto ministeriale 12 luglio 2007;
- in materia di congedo per malattia, le disposizioni di cui all'art. 1 comma 788 della Legge 27 dicembre 2006 n. 296 e successive modificazioni.

Nel periodo di astensione obbligatoria per maternità l'indennità corrisposta dall'INPS ai sensi dell'art. 5 del Decreto ministeriale 12 luglio 2007, è integrata dall'Università fino a concorrenza dell'intero importo dell'assegno di ricerca.

Il pagamento dell'assegno sarà effettuato in rate mensili posticipate.

Art. 10

I dati raccolti nell'ambito della procedura di cui all'art. 5 sono necessari per la corretta gestione della procedura di selezione, per l'eventuale successiva gestione dell'assegno di ricerca e per finalità connesse alla gestione dei servizi erogati dall'Università. L'Università degli Studi di Udine è il Titolare del Trattamento. In ogni momento, l'interessato può richiedere l'accesso, la rettifica nonché, compatibilmente con le finalità istituzionali dell'Ateneo, la cancellazione e la limitazione del trattamento o opporsi al trattamento dei propri dati. Può sempre proporre reclamo al Garante Italiano per la protezione dei dati. L'informativa completa è disponibile sul sito dell'Università degli Studi di Udine nella sezione "privacy" accessibile dalla home page www.uniud.it Link Diretto: <https://www.uniud.it/it/it/pagine-speciali/guida/privacy>

Art. 11

Per quanto non espressamente citato nel presente bando si fa riferimento alla normativa vigente in materia citata in premessa ed al "Regolamento interno per il conferimento di assegni di ricerca ex Legge 30 dicembre 2010 n. 240" dell'Università degli Studi di Udine emanato con Decreto rettorale 31 marzo 2021, n. 182.

Art. 12

Il funzionario responsabile del procedimento è la dott.ssa Sandra Salvador, Responsabile dell'Area Servizi per la Ricerca dell'Università degli Studi di Udine.

L'ufficio di riferimento presso l'Università degli Studi di Udine è l'Area Servizi per la Ricerca – Ufficio Formazione per la Ricerca, via Mantica n. 31 - 33100 Udine.

Per chiedere informazioni sul bando compilare il seguente modulo disponibile sul sito dell'Università degli Studi di Udine: https://helpdesk.uniud.it/SubmitSR.jsp?type=req&accountId=universityofudine&populateSR_id=42105



Allegato A

Responsabile scientifico della ricerca / Principal investigator:

Nome e cognome / Name and surname: Paolo Giannozzi
 Qualifica / Position: Professore Associato / Associate Professor
 Dipartimento / Department: Scienze Matematiche, Informatiche e Fisiche (DMIF) / Mathematics, Computer Science and Physics
 Area MUR / Research field: 02 - Scienze Fisiche
 Settore concorsuale e Settore scientifico disciplinare / Scientific sector: 02/PHYS-04; PHYS-04/A - Fisica teorica della materia, modelli, metodi matematici e applicazioni

Titolo dell'assegno di ricerca / Topic of the research fellowship "assegno di ricerca":

I bandi sono consultabili dal sito dell'Ateneo, del MUR e di Euraxess / The calls are available on the University, MUR and Euraxess websites

Testo in italiano:

Caratterizzazione dell'attività di enzimi in deep eutectic solvents.

Text in English:

Characterization of the activity of enzymes in deep eutectic solvents.

Obiettivi previsti e risultati attesi del programma di ricerca in cui si colloca l'attività dell'assegnista di ricerca / Foreseen objectives and results of the research programme performed by the research fellow "assegnista di ricerca":

I bandi sono consultabili dal sito dell'Ateneo, del MUR e di Euraxess / The calls are available on the University, MUR and Euraxess websites

Testo in italiano:

Abstract del progetto	I "deep eutectic solvents" (DES) costituiscono un'interessante alternativa "verde" ai solventi tradizionali. Vogliamo studiare le reazioni che avvengono in essi dal punto di vista microscopico, con simulazioni atomistiche di dinamica molecolare complementate da simulazioni da principi primi e in collaborazione con gruppi sperimentali. Questo progetto estende e completa i risultati del progetto PON "Caratterizzazione della reattività di composti in ionic liquids e deep eutectic solvents", attualmente nella sua fase finale.
Obiettivi del progetto	Ottenere una comprensione profonda a livello molecolare dell'attività di diversi catalizzatori proteici in deep eutectic solvents e di reazioni che coinvolgono il solvente stesso, con il fine ultimo di migliorare la progettazione di processi chimici più rispettosi dell'ambiente. In particolare si vogliono studiare le reazioni catalizzate da lipasi in diversi DES sviluppando protocolli di simulazione e analisi.
Stato dell'arte	Negli ultimi anni una possibile alternativa di basso impatto ambientale ai solventi tradizionali, largamente usati nell'industria, è stata individuata nei cosiddetti "deep eutectic solvents", o DES [1-2]. Tali solventi sono ottenuti mescolando molecole con accettori e donori di legami a idrogeno, che formano un eutettico (cioè un liquido con punto di fusione molto più basso di quello delle due componenti). Per esempio, un DES molto studiato è la miscela cloruro di colina (ChCl, accettore) – urea (donore) in proporzione 2:1, con temperatura di fusione $T=12\text{ °C}$ rispetto a $T_a=302\text{ °C}$ e $T_d=133\text{ °C}$. I DES hanno un interesse pratico come solventi, benché la loro elevata viscosità ne limiti le possibili applicazioni. Sono di particolare interesse i



	<p>DES reattivi formati da componenti naturali (R-NADES), in cui il DES gioca un ruolo sia di solvente che di reagente. Nel corso del progetto PON "Caratterizzazione della reattività di composti in ionic liquids e deep eutectic solvents" sono stati studiati in particolare le reazioni di esterificazione con lipasi in DES formati da miscele di ChCl e zuccheri quali xilitolo, sorbitolo, arabitol [3]. È attualmente in corso lo studio di R-NADES in cui la parte zuccherina è composta da glucosio o saccarosio e della differente reattività dei due casi [4].</p>
Descrizione del progetto	<p>Il ricercatore che viene richiesto svolgerà ricerca in questa area sviluppando un approccio multiscala per caratterizzare le proprietà chimico-fisiche e la termodinamica dei solventi e per sviluppare modelli predittivi per queste stesse proprietà.</p> <p>Le proprietà chimico-fisiche di questi solventi saranno studiate con i metodi della simulazione di dinamica molecolare e della meccanica statistica. Per capire la reattività di composti in tali solventi si considereranno anche simulazioni di dinamica molecolare da principi primi (basata sulla teoria del funzionale della densità) e l'uso di tecniche avanzate quali QM-MM (che combina meccanica quantistica e meccanica molecolare) e metadinamica. Sarà inoltre considerata l'applicazione delle nuove tecniche innovative di "Machine Learning" per estrarre informazione dalle simulazioni.</p> <p>L'obiettivo è quello di fornire strumenti computazionali comunemente disponibili per molecole in solvente acquoso. I risultati attesi sono la comprensione e la capacità di prevedere l'effetto di solventi green sulle proprietà chimico-fisiche e termodinamiche, quali la solubilità, gli equilibri di ionizzazione e gli effetti sull'entropia dei soluti. Queste proprietà determinano la possibilità di utilizzare un dato solvente per reazioni chimiche o anche per separare e purificare i soluti. In particolare si studieranno reazioni catalizzate da proteine per cui gli studi in DES sono ancora molto ridotti.</p> <p>Attraverso il confronto con i dati sperimentali i modelli verranno raffinati e specifici protocolli di simulazione e analisi saranno sviluppati. La comprensione della solvatazione di diverse molecole e della loro reattività in diversi solventi di interesse per la chimica verde porterà allo sviluppo di software predittivo [5].</p>
Possibili potenzialità applicative	<p>La possibilità di utilizzare solventi meno impattanti sull'ambiente ha implicazioni dirette riguardo l'ambiente e il rispetto della biodiversità, oltre che in maniera indiretta riguardo al clima.</p>
Bibliografia	<ol style="list-style-type: none">1. Deep eutectic solvents for biocatalytic transformations: focused lipase-catalyzed organic reactions, J.N. Tan, Y. Dou, Appl. Microbiol. Biotechnol. 104, 1481 (2020)2. Deep Eutectic solvents as efficient solvents in biocatalysis, M. Pätzold, S. Siebenhaller, S. Kara, A. Liese, C. Syldatk, D. Holtmann, Trends Biotechnol. 37, 943 (2019)3. Reactive natural deep eutectic solvents increase selectivity and efficiency of lipase catalyzed esterification of carbohydrate polyols, A. R. Buzatu, M. A. Soler, S. Fortuna, O. Ozkilinc, D. M. Dreava, I. Bitcan, V. Badea, P. Giannozzi, F. Fogolari, L. Gardossi, F. Peter, A. Todea, C. G. Boeriu, Catalysis Today 426, 114373 (2024)4. Unexpected reaction pathway of lipase-catalysed esterification in a reactive natural deep eutectic solvent, A. R. Buzatu, M. A. Soler, O. Ozkilinc, S. Fortuna, D. M. Dreava, I. Bitcan, V. Badea, P. Giannozzi, F. Fogolari, L. Gardossi, F. Peter, A. Todea, C. G. Boeriu, inviato per la pubblicazione a Green Chemistry5. Molecular electrostatics and pKa shifts calculations with the Generalized Born



	model. A tutorial through examples with Bluess2, M. A. Soler, O. Ozkilinc, Y. Hunashal, P. Giannozzi, G. Esposito and F. Fogolari, Comput. Phys. Commun. 287, 108716 (2023)
--	---

Text in English:

Abstract	Deep eutectic solvents (DES) are an interesting “green” alternative to traditional solvents [1-2]. We want to study the reactions that happen inside them from the microscopic point of view, using atomistic simulations based on molecular dynamics, complemented by first principle simulations and working in collaboration with experimental groups. This project extends and completes the results of the PON project “ <i>Characterization of reactivity of compounds in ionic liquids and deep eutectic solvents</i> ”, presently in its final stage.
Objectives of the project	To obtain a deep understanding at the molecular level of the activity of various catalyzers based on proteins in deep eutectic solvents and of reactions that may involve the solvent itself, with the final goal to improve the design of chemical processes with reduced environment impact. In particular we want to study the reactions catalyzed by lipases in different DES, with the further goal to develop simulation and analysis protocols.
State of the art	In recent years, a possible alternative with low environmental impact to traditional solvents, widely used in industry, has been identified in the so-called “deep eutectic solvents”, or DES [1-2]. These solvents are obtained by mixing molecules with hydrogen bond acceptors and donors, which form a eutectic (i.e. a liquid with a melting point much lower than that of the two components). For example, a well-studied DES is the mixture of choline chloride (ChCl, acceptor) and urea (donor) in a 2:1 ratio, with melting temperature $T=12\text{ }^{\circ}\text{C}$ compared to $T_a=302\text{ }^{\circ}\text{C}$ and $T_d=133\text{ }^{\circ}\text{C}$. DES have a practical interest as solvents, although their high viscosity limits their possible applications. Of particular interest are reactive DES formed from natural components (R-NADES), in which DES plays a role as both solvent and reagent. During the PON project “Characterization of the reactivity of compounds in ionic liquids and deep eutectic solvents”, the esterification reactions with lipases in DES formed by mixtures of ChCl and sugars such as xylitol, sorbitol, arabitol were studied in particular[3]. Currently, R-NADES in which the sugar part is composed of glucose or sucrose is being studied, with special attention to the different reactivity of the two cases [4].
Project description	The requested researcher will carry out research in this area by developing a multiscale approach to characterize the physico-chemical properties and thermodynamics of solvents and to develop predictive models for these same properties. The physico-chemical properties of these solvents will be studied with the methods of molecular dynamics simulations and statistical mechanics. To better understand the reactivity of compounds in such solvents, first-principle molecular dynamics simulations (i.e., based on density-functional theory) and the use of advanced techniques such as QM-MM (combining quantum mechanics and molecular mechanics) and metadynamics will also be considered. The application of new innovative Machine Learning techniques to extract information from simulations will also be envisaged. The goal is to provide computational tools such as those commonly available for molecules in aqueous solvent. The expected results are the understanding and the ability to predict the effect of green solvents on



	<p>chemical-physical and thermodynamic properties, such as solubility, ionization equilibria and effects on solute entropy. These properties determine the possibility of using a given solvent for chemical reactions or even to separate and purify solutes. In particular, protein-catalyzed reactions will be studied, for which studies in DES are still very limited.</p> <p>Through comparison with experimental data, the models will be refined and specific simulation and analysis protocols will be developed. Understanding the solvation of different molecules and their reactivity in different solvents of interest to green chemistry will lead to the development of predictive software [5].</p>
Possible application potentialities	The possibility of using solvents that have less impact on the environment has direct implications for the environment and respect for biodiversity, as well as indirectly for the climate.
References	<ol style="list-style-type: none"> 1. Deep eutectic solvents for biocatalytic transformations: focused lipase-catalyzed organic reactions, J.N. Tan, Y. Dou, Appl. Microbiol. Biotechnol. 104, 1481 (2020) 2. Deep Eutectic solvents as efficient solvents in biocatalysis, M. Pätzold, S. Siebenhaller, S. Kara, A. Liese, C. Syldatk, D. Holtmann, Trends Biotechnol. 37, 943 (2019) 3. Reactive natural deep eutectic solvents increase selectivity and efficiency of lipase catalyzed esterification of carbohydrate polyols, A. R. Buzatu, M. A. Soler, S. Fortuna, O. Ozkilinc, D. M. Dreava, I. Bitcan, V. Badea, P. Giannozzi, F. Fogolari, L. Gardossi, F. Peter, A. Todea, C. G. Boeriu, Catalysis Today 426, 114373 (2024) 4. Unexpected reaction pathway of lipase-catalysed esterification in a reactive natural deep eutectic solvent, A. R. Buzatu, M. A. Soler, O. Ozkilinc, S. Fortuna, D. M. Dreava, I. Bitcan, V. Badea, P. Giannozzi, F. Fogolari, L. Gardossi, F. Peter, A. Todea, C. G. Boeriu, submitted for publication to Green Chemistry 5. Molecular electrostatics and pKa shifts calculations with the Generalized Born model. A tutorial through examples with Bluees2, M. A. Soler, O. Ozkilinc, Y. Hunashal, P. Giannozzi, G. Esposito and F. Fogolari, Comput. Phys. Commun. 287, 108716 (2023)

Struttura dell'Università di Udine presso la quale verrà sviluppata l'attività di ricerca / Department or other structure of the University of Udine where research activities will be carried out:

Dipartimento di Scienze Matematiche, Informatiche e Fisiche (DMIF). / Department of Mathematics, Computer Science and Physics.

Importo dell'assegno di ricerca (al lordo oneri carico assegnista) / Total grant gross for the research fellowship:

€ 19.367,00

Durata dell'assegno di ricerca / Duration of the research fellowship "assegno di ricerca":

12 mesi / months

Finanziamento / Financed by:

La copertura finanziaria graverà sui fondi/progetti:

- risorse d'Ateneo: bando interno finanziamento assegni 2024 (D.R. n. 181/2024) - CUP: G23C24000370005;
- fondi del Piano Strategico Dipartimentale (codice U-GOV: PSD_2022_2025_DMIF_Ric_Libera);
- fondi di ricerca libera del prof. Paolo Giannozzi (codice U-GOV: RICLIB_GIANNOZZI).



Requisiti di ammissione / Minimum qualifications necessary:

Possesso del titolo di Dottore di ricerca o titolo equivalente conseguito all'estero. / Possession of a Research doctorate or equivalent qualification obtained abroad.

Modalità di presentazione della documentazione oggetto di valutazione / Arrangements for the submission of documents:

La modalità di presentazione della documentazione oggetto di valutazione è specificata all'art. 4 del bando. / The way of presenting the documentation under evaluation is specified in art. 4 of the present notice.

Ai fini valutativi, i candidati potranno presentare le pubblicazioni e ogni altro titolo ritenuto utile a comprovare la propria qualificazione in relazione al programma di ricerca descritto nell'Allegato A, nelle seguenti lingue: / For evaluation purposes, candidates may present publications and any other qualifications deemed useful to demonstrate their qualification in relation to the research program described in Attachment A, in the following languages:

- Italiano / Italian
- Inglese / English

Procedura selettiva / Competition procedure:

Valutazione per titoli e colloquio. / Evaluation of titles and oral exam.

I risultati della valutazione dei titoli saranno resi noti agli interessati nel corso del colloquio. / The evaluation of the qualifications will be disclosed to candidates during the interview.

Calendario del colloquio / Calendar of the oral exam	Modalità / Modality	Videoconferenza / Videoconference
	Data / Date	20 settembre / September 2024
	Ora / Time	10:00 / 10:00 am (Italian time)
	Luogo / Place	-

Per sostenere il colloquio i candidati devono esibire un valido documento di riconoscimento. / Candidates must come to the interview with a valid identity document.

Eventuali variazioni saranno rese note esclusivamente mediante pubblicazione all'albo ufficiale on line dell'Ateneo / Any change will be made public solely through publication on the University web site http://web.uniud.it/ateneo/normativa/albo_ufficiale

Nota / Note: Le indicazioni sulle modalità di svolgimento della prova in modalità telematica saranno inviate ai candidati con successiva email da parte del Presidente della Commissione. Ai fini dell'identificazione e a pena di esclusione dalla procedura selettiva, ciascun candidato è tenuto ad identificarsi prima che il colloquio abbia inizio, esibendo il medesimo documento di identità allegato alla domanda di ammissione al concorso. Il candidato deve risultare reperibile nella giornata e all'orario indicato sul bando. Il mancato collegamento, l'irreperibilità del candidato nel giorno o nell'orario stabilito o la mancata esibizione del documento identificativo, sono motivo di esclusione dalla procedura selettiva. La registrazione delle prove orali è vietata. L'Ateneo adoterà pertanto tutti i provvedimenti in suo potere per tutelare i soggetti coinvolti qualora venissero diffuse tramite internet – o altri mezzi di diffusione pubblica – video, audio o immagini della procedura selettiva. / Instructions on how the video



interviewing will be conducted will be provided to candidates by the Chairman of the Examining Board via email. For identification purposes, each candidate is required to identify him/herself before the interview by exhibiting the same identification document attached to the application. Candidates must be available on the day and time established by the call for applications. Failure of the candidate to establish a video connection, the unavailability of the candidate on the day and/or time established or failure of the candidate to provide the required identification document are all grounds for exclusion from the selection procedure. Recording of the video interviews is prohibited. The University will adopt all the measures within its power to protect all personnel involved as a result of dissemination via the internet or via other forms of public dissemination, of videos, audios or other pictures of the selection procedures.

Commissione giudicatrice / Examining Board:

Nome e Cognome	Qualifica	SSD	Università
Membri Effettivi / Permanent members			
Federico Fogolari	PA	PHYS-06/A	Università degli Studi di Udine
Francesca Baletto	PA	PHYS-04/A	Università degli Studi di Milano
Angelo Rosa	PA	PHYS-04/A	Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) di Trieste
Membro Supplente / Temporary member			
Cristian Micheletti	PO	PHYS-04/A	Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) di Trieste