



DECRETO  
RETTORALE

## 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 "Catalizzatori biomimetici fra due e tre dimensioni: effetti della sfera di coordinazione dei secondi vicini" SSD: FIS/03 (responsabile scientifico, Paolo Giannozzi).**

**Assegno di ricerca finanziato a valere sulle risorse del progetto PRIN 2022 PNRR, Prot. n. P2022B3WCB, dal titolo "Shedding light where 2D materials go 3D: energy transfer and second coordination sphere at biomimetic model surfaces (2Dto3D)". Avviso pubblico n. 1409 del 14/09/2022 – PRIN 2022 PNRR M4C2 Inv. 1.1. CUP G53D23007020001.**

### Art. 1

È indetta una selezione per l'attribuzione di 1 assegno per lo svolgimento di attività di ricerca presso l'Università degli Studi di Udine, 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 e subordinato alla relativa copertura finanziaria.

Nello specifico, il progetto si colloca nell'ambito del Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza (di seguito PNRR) – Missione 4: Istruzione e ricerca, Componente 2: Dalla ricerca all'impresa, Investimento 1.1: Fondo per il Programma Nazionale della Ricerca (PNR) e Progetti di Ricerca di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN), finanziato dall'Unione Europea - NextGenerationEU. Progetto PRIN 2022 PNRR, Prot. n. P2022B3WCB, dal titolo "Shedding light where 2D materials go 3D: energy transfer and second coordination sphere at biomimetic model surfaces (2Dto3D)". CUP G53D23007020001.

L'assegno può essere rinnovato in conformità con quanto previsto dall'art. 22 della Legge 30 dicembre 2010, n. 240 (nel testo vigente prima della data di entrata in vigore della Legge di conversione del D.L. 36/2022, L. 79/2022), dalla Legge 27 febbraio 2015, n. 11 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.

Le attività oggetto dell'assegno di ricerca rispetteranno il principio Do No Significant Harm (di seguito DNSH) del PNRR, ovvero non arrecheranno danni significativi all'ambiente.

Questo bando garantisce il rispetto delle pari opportunità generazionali, di genere e territoriali.

I risultati delle ricerche condotte nell'ambito dell'assegno di ricerca ed i relativi dati verranno pubblicati rispettando i principi "Open Science" e "FAIR data".

L'assegno di ricerca non dà luogo ad alcun diritto in ordine all'accesso ai ruoli dell'Università.

Eventuali comunicazioni personali ai candidati relative alla presente selezione saranno trasmesse esclusivamente all'indirizzo e-mail indicato in sede di iscrizione alla selezione, come da procedura di cui all'art. 5.

## DECRETO RETTORALE

### Art. 2

L'assegnazione di ricerca oggetto del presente bando di concorso ed i relativi requisiti di ammissione sono indicati e descritti nell'Allegato A. La mancanza dei requisiti di ammissione comporta l'esclusione 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'assegnazione oggetto della presente selezione, qualora non sia stato previsto quale requisito obbligatorio.

La Commissione giudicatrice (v. art. 7) 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 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 anche qualora la documentazione presentata non fornisca gli elementi sufficienti per la valutazione. Il candidato deve pertanto allegare tutta la documentazione in suo possesso relativa al proprio titolo al fine di fornire alla Commissione elementi sufficienti per la valutazione.

I candidati in possesso di un titolo di studio conseguito all'estero, se vincitori, devono presentare, qualora non già allegato alla domanda di partecipazione alla selezione:

**Per i titoli di studio rilasciati da un paese appartenente all'Unione Europea, una delle seguenti opzioni:**

- Diploma Supplement in inglese rilasciato dall'Università competente.
- "Attestato di comparabilità 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 extra Unione Europea, 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 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 il Diploma Supplement o la dichiarazione/attestato di comparabilità non sono disponibili in sede di stipula del contratto, il candidato deve dimostrare di averne fatto richiesta e presentarli non appena possibile.

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

## DECRETO RETTORALE

### Art. 3

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

- a) ai dipendenti delle Università e dei soggetti di cui all'art. 22, comma 1, della legge 30 dicembre 2010, n. 240 (nel testo antecedente la riforma introdotta dalla Legge 29 giugno 2022, n. 79);
- b) a coloro che hanno già usufruito di assegni di ricerca ex legge 30 dicembre 2010, n. 240 (ante riforma introdotta dalla Legge 29 giugno 2022, n. 79) per il periodo massimo consentito dalla normativa, ad esclusione del periodo in cui l'assegnò 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 previsti rispettivamente dagli artt. 22 e 24 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 (nel testo antecedente la riforma introdotta dalla Legge 29 giugno 2022, n. 79) 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 sede dell'attività dell'assegnò di ricerca d'interesse.

L'assegnò 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 part time, fatto salvo quanto previsto in materia per i dipendenti di pubbliche amministrazioni.

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

### Art. 4

I candidati devono allegare alla domanda di partecipazione alla selezione, a pena di esclusione:

- a) il curriculum scientifico professionale, dove siano evidenziate le attitudini del candidato idonee allo svolgimento e alla realizzazione del programma della ricerca (Allegato A);
- b) il documento di identità o altro documento di identificazione;
- c) (per i soli candidati con titolo di accesso conseguito all'estero) certificazione o autocertificazione del titolo accademico previsto per l'ammissione alla selezione e degli esami (con relativa valutazione) sostenuti durante il percorso di studio svolto all'estero e ogni ulteriore documento utile al fine della valutazione del titolo da parte della Commissione giudicatrice.

Alla domanda di partecipazione possono essere allegati ai fini valutativi, pubblicazioni e ogni altro titolo ritenuto utile a comprovare la qualificazione del candidato in relazione al programma di ricerca (Allegato A) e ad attestare l'eventuale attività di ricerca svolta presso soggetti pubblici e/o privati (con indicazione della decorrenza e durata).

I documenti e i titoli sopra citati devono essere presentati in lingua italiana o inglese, pena la non valutazione. I documenti e i titoli, originariamente in lingua diversa, devono essere accompagnati da una

## DECRETO RETTORALE

traduzione in italiano o in inglese effettuata dal candidato, sotto la sua responsabilità. La traduzione può limitarsi ad un abstract esteso con riferimento alla sola tesi.

I candidati italiani e comunitari che intendono presentare titoli riferiti a stati e fatti attestati da Pubbliche Amministrazioni devono procedere esclusivamente con autocertificazione.

I cittadini extracomunitari, regolarmente soggiornanti in Italia, possono autocertificare solo i dati verificabili o certificabili da soggetti pubblici italiani. Possono inoltre utilizzare le dichiarazioni sostitutive quando previsto da una convenzione internazionale presente tra l'Italia e il Paese di provenienza del dichiarante.

I cittadini extracomunitari non soggiornanti in Italia non possono autocertificare.

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.

Costituisce causa di esclusione dalla selezione la mancata presentazione dei documenti obbligatori previsti dal presente articolo.

### Art. 5

Le iscrizioni alla selezione iniziano il 23 novembre 2023 ore 14:00 (ora italiana) e terminano il 16 gennaio 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/>

La procedura prevede una fase di registrazione del candidato, per coloro che non hanno già un'utenza, e una fase successiva di compilazione della domanda.

Una volta completata, la domanda on line deve essere firmata con le modalità (firma manuale, con allegato documento di identità, o firma digitale) descritte nella procedura on line, a pena di esclusione dalla selezione. La domanda non dovrà essere firmata qualora si acceda alla procedura online sopraccitata mediante identificativo SPID.

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.

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

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.

Non è consentito il riferimento a documenti e pubblicazioni già presentati in occasione di altri concorsi.

L'Amministrazione non si assume alcuna responsabilità per il caso di dispersione di comunicazioni dipendente da inesatte indicazioni della residenza e del recapito da parte dell'aspirante o da mancata,

## DECRETO RETTORALE

oppure tardiva, comunicazione del cambiamento degli stessi, né per eventuali disguidi postali o telegrafici non imputabili a colpa dell'Amministrazione stessa.

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.

### 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 sul sito dell'albo ufficiale dell'Ateneo.

L'esito della valutazione non sarà oggetto di comunicazione 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 entro i termini comunicati dalla stessa anche con modalità non formali.

Deroghe a tale termine saranno concesse esclusivamente per cause di forza maggiore documentate.

## DECRETO RETTORALE

### 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.

Il recesso dal contratto può essere esercitato dall'assegnista o dalla struttura di riferimento.

Il contratto può essere risolto dalla struttura di riferimento, oltre che per le ipotesi di cui all'art. 9, comma secondo e terzo, del "Regolamento interno per il conferimento di assegni di ricerca ex legge 30 dicembre 2010 n. 240" dell'Università degli Studi di Udine, anche nel caso in cui venga meno il progetto di ricerca e pertanto la copertura finanziaria su cui grava l'assegno di ricerca.

### 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.

### 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

## DECRETO RETTORALE

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](http://www.uniud.it) Link Diretto: <https://www.uniud.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](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/B2; FIS/03 - Fisica della materia

### 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:

Catalizzatori biomimetici fra due e tre dimensioni: effetti della sfera di coordinazione dei secondi vicini.

#### Text in English:

Biomimetic catalyzers between two and three dimensions: effects of the second-neighbour coordination sphere.

### 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:

Lo scopo del progetto PRIN PNRR per il quale questa posizione è bandita è di comprendere le proprietà di catalizzatori modello biomimetici a singolo atomo aventi un carattere sia bidimensionale (2D) che tridimensionale (3D). Tale obiettivo può essere raggiunto solo tramite una combinazione di tecniche sperimentali e di simulazioni da principi primi, inizialmente in condizioni di ultra alto vuoto (UHV), successivamente in condizioni più realistiche (in particolare, in presenza di solvente). La produzione dei campioni e le misure sperimentali con varie tecniche saranno fatte dall'unità sperimentale del Prof. Vesselli presso l'Università di Trieste e lo IOM-CNR. La posizione bandita qui si occuperà dell'analisi teorica e delle simulazioni numeriche da principi primi (teoria del funzionale densità, DFT, ed estensioni), in stretta collaborazione con il partner sperimentale.

I catalizzatori ai quali siamo interessati sono formati per auto-assemblaggio di molecole metallorganiche su materiali 2D. Le eterostrutture funzionali che ne risultano contengono siti catalitici attivi di singolo atomo, che possono essere adattati a funzionare come materiali per applicazioni fotovoltaiche ed energetiche. Dato che l'attività catalitica che si vuole ottenere è spesso già presente in natura, è conveniente seguire un approccio "bio-mimetico", cioè: tramite opportune scelte dei substrati e delle molecole metallorganiche, produrre sistemi che imitano la struttura e sperabilmente anche le funzionalità di siti biologici attivi di enzimi, come ad esempio quelli responsabile della dissociazione dell'acqua nella fotosintesi.

Una via promettente suggerita dalla natura è quindi l'uso come "mattoni" di molecole contenenti anelli tetrapirrolici piatti con un atomo metallico al centro. La relazione fra questi materiali sintetici e la loro controparte biochimica è tuttavia non banale. L'attività catalitica dei siti enzimatici dipende da un bilanciamento delicato della struttura geometrica e degli stati elettronici del sito attivo, molto influenzato anche dagli atomi nei dintorni del sito. È persino discutibile se il termine "bio-mimetico" sia realmente



## DECRETO RETTORALE

appropriato, sia per le limitazioni nell'accesso ad una descrizione dettagliata a livello atomico, sia per i limiti intrinseci dei materiali 2D nel riprodurre la configurazione funzionale locale (in particolare la seconda sfera 3D di coordinazione) degli enzimi naturali. Ci occuperemo pertanto di quest'ultimo aspetto, sintetizzando un materiale modello 2D basato sul sito 3D reattivo (atomo di Co) della cobalamina (vitamina B12) e studiandone ad un livello fondamentale le interazioni laterali fra molecole, con il supporto (oro, grafene), con i ligandi, e in seguito con solventi e con la luce (dinamica).

Gli obiettivi specifici e i risultati attesi per questa posizione sono i seguenti: identificazione dei modelli teorici minimi che riproducono correttamente i risultati sperimentali in UHV; determinazione della struttura geometrica ed elettronica dello strato 2D di cobalamina su Au(111) e grafene/Ir(111) in UHV, prestando particolare attenzione al ruolo della seconda sfera di coordinazione; l'estensione a condizioni più realistiche (in particolare, in presenza di solventi); finalmente, lo studio di alcune reazioni di base quali O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> in interazione con il sito catalitico attivo.

### Text in English:

The goal of the PRIN-PNRR project for which this position is advertised is to understand the properties of biomimetic single-atom model catalyzers that have both a two-dimensional (2D) and a three-dimensional (3D) character. Such a goal can be achieved only via a combination of experimental techniques and first-principle simulations, in ultra-high-vacuum (UHV) conditions first, under more realistic conditions (notably in the presence of a solvent) at a later stage. Fabrication and experimental measurements with various techniques will be performed by the experimental unit of Prof. Vesselli at University of Trieste and IOM-/CNR. The recipient of this position will perform the theoretical analysis and numerical simulations using first-principle techniques (density-functional theory, DFT, and extensions), in close collaboration with the experimental partner.

The catalyzers we are interested in are formed by self-assembly of metal-organic molecules over 2D materials, yielding functional heterostacks. These contain single-atom active catalytic sites, that can be tuned e.g., for photovoltaic and photocatalytic energy applications. Since the catalytic activity we want to achieve is often already available in nature, it is convenient to follow a "bio-mimetic" approach, that is: by means of a suitable choice of the substrate and metal-organic molecules, produce systems that mimic the structure and hopefully the function of biological active enzymatic sites, such as e.g., those responsible for water splitting in photosynthesis.

Thus, a promising path suggested by nature is to use as building blocks molecules containing flat tetrapyrroles rings with a catalytic atom in the center. The link between these synthetic materials and their biochemical counterpart is however far from obvious. The catalytic activity of enzymatic sites depends upon a delicate balance of the geometrical structure and of electronic states of the active sites, heavily involving surrounding atoms as well. It is even questionable whether the term biomimetic is ultimately appropriate, both for limitations in accessing a detailed, atomic-level description at ambient conditions and for the intrinsic limits of 2D materials in reproducing the 3D local functional second-coordination sphere of natural biochemical pockets. We will therefore tackle the role of the latter, by synthesizing a model 2D material based on the 3D single-atom (Co) reaction sites of cobalamin (vitamin B12) and by investigating lateral, support (gold, graphene), ligands interactions, and at a later stage solvents and light (dynamic) interactions, at the fundamental level.

The specific objectives and expected results for this position include: the identification of the minimal theoretical models that correctly reproduce experimental findings in UHV; the determination of the geometric and electronic structures of the 2D layers of cobalamin on Au(111) and graphene/Ir(111) in UHV, with special attention to the role of the second coordination sphere; the effects of the extension to more realistic conditions (e.g. presence of solvent); finally, the study of some basic reactions involving O<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> interacting with the active catalytic site.

DECRETO  
RETTORALE

**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:**

€ 47.114,25

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

18 mesi / months

**Finanziamento / Financed by:**

La copertura finanziaria graverà sul progetto PRIN 2022 PNRR - "Shedding light where 2D materials go 3D: energy transfer and second coordination sphere at biomimetic model surfaces (2Dto3D)"; Prot. n. P2022B3WCB. Avviso pubblico n. 1409 del 14/09/2022. Decreto di finanziamento n. 1381 del 01/09/2023 - Settore PE3. Codice CUP G53D23007020001. Ministero dell'Università e della Ricerca (Finanziato dall'Unione Europea, NextGenerationEU).

**Requisiti di ammissione / Minimum qualifications necessary:**

- Possesso del titolo di Dottore di ricerca o titolo equivalente conseguito all'estero;
- possesso di un curriculum scientifico professionale idoneo allo svolgimento dell'attività di ricerca contemplata.
- Research doctorate or equivalent qualification obtained abroad;
- professional scientific curriculum suitable for the research activity above mentioned.

**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	24 gennaio / January 2024
	Ora / Time	14:30 / 2:30 pm (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.

## DECRETO RETTORALE

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](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 adotterà 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
<b>Membri Effettivi / Permanent members</b>			
Paolo Giannozzi	PA	FIS/03	Università degli Studi di Udine
Erik Vesselli	PA	FIS/03	Università degli Studi di Trieste
Maria Peressi	PO	FIS/03	Università degli Studi di Trieste
<b>Membri Supplenti / Temporary members</b>			
Federico Fogolari	PA	FIS/07	Università degli Studi di Udine
Miguel Angel Soler Bastida	RTD	FIS/03	Università degli Studi di Udine