



IL DIRETTORE GENERALE

Visto: l'art. 7 comma 6 del Decreto Legislativo 30 marzo 2001 n. 165 e successive modificazioni e integrazioni;

Visto: il Regolamento per l'affidamento a terzi estranei all'Università di incarichi di carattere intellettuale come modificato con decreto rettorale n. 0267760 del 23/04/2010;

Visto: il Progetto "Studio tecnico-computazionale della bonifica fotocatalitica di atmosfere inquinate (QURE)" Codice Cup G41I16000020001;

Visto: l'avviso di conferimento rivolto al personale interno datato 09/07/2020 e pubblicato all'albo della struttura e sul sito web d'Ateneo;

Considerato: che tale avviso di conferimento rivolto al personale interno è andato deserto;

Visto: l'avviso di procedura comparativa ID 1634, rep. n. 9499/2020 del 05/08/2020 per l'affidamento di un incarico di collaborazione di lavoro autonomo, della durata di 12 mesi e per un compenso di 16.752,96 Euro lordo al collaboratore per attività di supporto alla ricerca, per il raggiungimento dei seguenti obiettivi:

- Calcolo di spettri IR di molecole adsorbite su TiO_2 . Nello specifico l'obiettivo è quello di simulare lo spettro IR di molecole inquinanti e non adsorbite sulla superficie del polimorfo anatasio del titanio con lo scopo finale di capire meglio se eventuali inquinanti adsorbono e possono essere fotodegradati tramite il supporto di anatasio.

Svolgendo la seguente attività:

- Coding della sorgente del Quantum Espresso (QE) e di eventuali programmi di supporto homemade o scripts per il calcolo di spettri IR e vibrazionale in generale mediante metodi semiclassici già sviluppati nel gruppo di ricerca;
- Simulazione di dinamica semiclassica on-the-fly usando il QE con definizioni delle condizioni iniziali, cioè traiettorie NVE e analisi delle traiettorie;
- Implementazione di nuovi metodi semiclassici per migliorare le performance del calcolo degli spettri di molecole adsorbite su anatasio;
- Test e simulazioni con diverse molecole inquinanti e rilevamento di eventuali spettri IR di intermedi su anatasio da poter confrontare con risultati sperimentali esistenti;



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

- Ricerca di nuovi meccanismi di frammentazione di gas NO_x su superfici di titanio anatasio.

Visto: il verbale di selezione del 28/09/2020 da cui risulta idoneo il Dott. Marco Cazzaniga;

Considerato: che l'importo lordo pari a Euro 16.752,96 risulta congruo per l'attività in esso dedotta;

Verificato: il budget nell'ambito del progetto FARE18MCEOT_01 - n. creazione U-Gov 24956 del Dipartimento di Chimica;

Visto: il verbale del 28/09/2020 da cui risultano attribuiti ai candidati i seguenti punteggi:

COGNOME E NOME	LUOGO E DATA DI NASCITA	PUNTI
Cazzaniga Marco	Carate Brianza (MB) - 28/10/1981	91/100

DETERMINA

L'approvazione degli atti della procedura comparativa ID 1634, rep. n. 9499/2020 del 05/08/2020;

La stipula di un contratto individuale di collaborazione al Dott. Marco Cazzaniga per attività di supporto alla ricerca finalizzata al raggiungimento dei seguenti obiettivi:

- Calcolo di spettri IR di molecole adsorbite su TiO₂. Nello specifico l'obiettivo è quello di simulare lo spettro IR di molecole inquinanti e non adsorbite sulla superficie del polimorfo anatasio del titanio con lo scopo finale di capire meglio se eventuali inquinanti adsorbono e possono essere fotodegradati tramite il supporto di anatasio.

Svolgendo la seguente attività:

- Coding della sorgente del Quantum Espresso (QE) e di eventuali programmi di supporto homemade o scripts per il calcolo di spettri IR e vibrazionale in generale mediante metodi semiclassici già sviluppati nel gruppo di ricerca;
- Simulazione di dinamica semiclassica on-the-fly usando il QE con definizioni delle condizioni iniziali, cioè traiettorie NVE e analisi delle traiettorie;
- Implementazione di nuovi metodi semiclassici per migliorare le performance del calcolo degli spettri di molecole adsorbite su anatasio;
- Test e simulazioni con diverse molecole inquinanti e rilevamento di eventuali spettri IR di intermedi su anatasio da poter confrontare con risultati sperimentali esistenti;



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

- Ricerca di nuovi meccanismi di frammentazione di gas NO_x su superfici di titanio anatasio.

Tale attività sarà da svolgersi nell'ambito del Progetto "Studio tecnico-computazionale della bonifica fotocatalitica di atmosfere inquinate (QURE)" Codice Cup G41I16000020001;

Il contratto, che prevede un importo lordo al collaboratore pari a Euro 16.752,96, avrà la durata di n. 12 mesi e sarà svolto a favore del Dipartimento di Chimica;

Il corretto svolgimento dell'incarico sarà verificato dal Prof. Michele Ceotto;

Il costo di 22.000,00 Euro graverà sul progetto FARE18MCEOT_01 - n. creazione U-Gov 24956 del Dipartimento di Chimica.

IL DIRETTORE GENERALE

Roberto Conte