

All. 1 – Piano delle attività

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca:

Simulazione di dinamiche molecolari non adiabatiche mixed quantum-classiche e/o quantistiche per il processo fotoindotti in cromofori organici. Calcolo di spettroscopie elettroniche. Design di impulsi laser di controllo.

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca in inglese:

Simulation of nonadiabatic molecular dynamics using mixed quantum–classical and/or fully quantum approaches for photoinduced events in selected organic chromophores. Calculation of electronic spectroscopy. Design of laser control pulses.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico:

Assistenza e/o tutoraggio e/o supervisione a laureandi triennali e/o magistrali.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico in inglese:

Assistance, tutoring, and/or supervision of undergraduate and/or master's degree students involved in research activities.

- Piano delle attività:

- 1) Confronto fra simulazione di dinamiche molecolari non adiabatiche mixed quantum-classiche e quantistiche sui sistemi cromoforici organici selezionati con metodi multireference perturbativi.
- 2) Sviluppo di metodi di dinamica molecolare quantistica multidimensionale accurata.
- 3) Calcolo di spettroscopie transienti a diversi regimi spettrali.
- 4) Calcolo delle coerenze elettroniche e simulazione di tecniche sperimentali e segnali spettroscopici atte a misurarle (e.g., spettroscopie TRUECARS).
- 5) Design di impulsi laser di controllo nel NIR e in altri regimi spettrali.

- Piano delle attività in inglese:

- 1) Comparison between mixed quantum–classical and fully quantum nonadiabatic molecular dynamics simulations for selected organic chromophoric systems with multireference perturbative methods.
- 2) Development of accurate multidimensional quantum molecular dynamics methods.
- 3) Calculation of transient spectroscopies in different spectral regimes.
- 4) Calculation of electronic coherences and simulation of experimental techniques and spectroscopic signals designed to measure them (e.g., TRUECARS spectroscopy).
- 5) Design of control laser pulses in the NIR and other spectral regimes.

- Quantificazione figurativa delle attività annue, ai fini della rendicontazione dei costi sui progetti di ricerca:

1720 ore annue

1500 ore annue (nel solo caso in cui sia previsto da specifiche iniziative di finanziamento, es. FIS, PNRR, ...)