



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS
DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"

ECCELLENZA 2023-27

BANDO TOTALE CARICO

IL DIRETTORE

- VISTA la Legge 30 dicembre 2010 n.240, art.22, e s.m.i.;
- VISTO il Decreto Legge n.192 del 31 dicembre 2014, convertito in Legge n.11 del 27 febbraio 2015;
- VISTA la Legge n.476 del 13 agosto 1984 e successive modificazioni;
- VISTA la Legge n.335 dell'8 agosto 1995 e successive modificazioni;
- VISTA la Legge n.127 del 15 maggio 1997 e successive modificazioni;
- VISTO il D.P.R. n.445 del 28 dicembre 2000;
- VISTA la Legge n.241 del 7 agosto 1990 e successive modifiche;
- VISTO lo Statuto dell'Università degli Studi di Firenze;
- VISTO il vigente Regolamento di Ateneo di attuazione della legge n. 241/1990 e successive modifiche e integrazioni, in materia di accesso ai documenti amministrativi;
- VISTO il Decreto Legislativo n.196 del 30 giugno 2003, Codice sulla protezione dei dati personali;
- VISTO il vigente Regolamento di Ateneo in materia di protezione dei dati personali;
- VISTO il vigente Codice etico dell'Università degli Studi di Firenze;
- VISTO il Decreto Rettorale n.68910 (550) del 14 maggio 2020 di emanazione del "Regolamento per il conferimento di Assegni di ricerca di cui all'art.22 della legge 30 dicembre 2010 n.240";
- VISTO il Decreto del Ministro dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca 9 marzo 2011 n.102 che stabilisce l'importo minimo lordo annuo degli assegni di ricerca;
- VISTE le delibere del Senato Accademico e del Consiglio di Amministrazione rispettivamente del 29 aprile e 30 aprile 2020 che stabiliscono l'importo lordo annuo massimo degli assegni di ricerca;
- RICHIAMATO il Decreto Rettorale n.56053 (471) del 09/04/2020 contenente le Linee guida per lo svolgimento delle procedure concorsuali telematiche per assegni di ricerca e borse di studio e ricerca;
- VISTA la delibera del Consiglio del Dipartimento di Chimica 'Ugo Schiff' del 17/12/2024 che approva l'apertura di una nuova selezione per assegni finanziati dal Dipartimento per un importo di € 33.305,28 che graverà totalmente sul progetto iPAWNS - FIS2 - In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates - CUP B53C24009560001.
- VERIFICATA, a cura del Direttore di Dipartimento, la disponibilità finanziaria sul proprio bilancio per la copertura finanziaria dell'importo dell'assegno di cui al presente bando;

DECRETA

l'emanazione del seguente:

Bando di selezione, per titoli e colloquio per n. 1 Assegno dell'Area Scientifica per lo svolgimento di attività di ricerca.



Art.1

Oggetto del Bando

È indetta una selezione, per titoli e colloquio, a n. 1 Assegno per lo svolgimento di attività di ricerca da svolgersi come sotto indicato:

SETTORE DISCIPLINARE	PROGRAMMA DI RICERCA	REQUISITI CURRICULARI E TITOLI DI STUDIO AI SENSI DELL'ART.4 DEL REGOLAMENTO	INDIRIZZO DELLA STRUTTURA DI AFFERENZA
CHEM-03/A	<p>Titolo della Ricerca: Design High Throughput di Nanografeni open-shell per applicazioni di quantum computing attraverso metodi ab initio</p> <p>Responsabile Scientifico: Dott. Matteo Briganti</p>	<ul style="list-style-type: none">• Dottorato di ricerca in Fisica• Dottorato in Scienze Chimiche• Dottorato in Scienze Matematiche e Informatiche• Dottorato di ricerca In Scienza dei Materiali• Dottorato di ricerca, o PhD o titolo equivalente conseguito all'estero in ambito scientifico affine all'oggetto del bando • Curriculum scientifico-professionale idoneo allo svolgimento della ricerca	UGO-SCHIFF Via della Lastruccia, 3-13, 50019, Sesto Fiorentino (FI)

Il programma dettagliato della ricerca è parte integrante del presente bando.

Art.2

Conferimento dell'assegno - Rinnovo

Al vincitore sarà conferito un assegno pari a € **27.000,00 (ventisettemila/00)** annui, al lordo degli oneri previdenziali a carico dell'assegnista, che sarà erogato in rate mensili posticipate.

Nel caso in cui il vincitore sia un ricercatore residente all'estero ed in possesso del titolo di dottore di ricerca, o altro titolo equivalente conseguito all'estero, l'importo dell'Assegno sarà integrato, a titolo di mobility allowance, della somma annua di euro € **6.000,00 (seimila/00)** al lordo degli oneri previdenziali a carico dell'assegnista.

L'assegno è conferito per la durata di **12 mesi con decorrenza 01/04/2025** e potrà eventualmente essere rinnovato nel limite massimo di **sei** anni complessivi con lo stesso soggetto, come normato dall'art.22 della L.240/2010 e successive modificazioni, 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.

Ai fini della durata massima, non rilevano i periodi trascorsi in aspettativa per maternità o per motivi di salute, secondo quanto previsto dalla normativa vigente.

In caso di rinuncia o revoca i posti resisi disponibili possono essere assegnati ai candidati collocati in posizione utile nella graduatoria per un periodo non inferiore a 12 mesi e compatibilmente con le risorse disponibili.

Il rinnovo, alle stesse condizioni del contratto originario, è disposto dal Direttore del Dipartimento, su richiesta del Responsabile scientifico. Il rinnovo è subordinato alla positiva valutazione



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS
DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"
ECCCELLENZA 2023-27

dell'attività svolta da parte del responsabile della ricerca, oltre che alla effettiva disponibilità di bilancio.

Art.3

Requisiti per l'ammissione alla selezione

Possono candidarsi alla selezione i candidati in possesso di:

Titoli di studio richiesti:

- Dottorato di ricerca in Fisica
- Dottorato in Scienze Chimiche
- Dottorato in Scienze Matematiche e Informatiche
- Dottorato di ricerca In Scienza dei Materiali
- Dottorato di ricerca, o PhD o titolo equivalente conseguito all'estero in ambito scientifico affine all'oggetto del bando

I requisiti devono essere posseduti alla data di scadenza del bando.

Tutti i titoli conseguiti all'estero (laurea, dottorato ed eventuali altri titoli) dovranno essere, di norma, preventivamente riconosciuti in Italia secondo la legislazione vigente in materia. L'equivalenza dei predetti titoli conseguiti all'estero che non siano già stati riconosciuti, verrà valutata, unicamente ai fini dell'ammissione del candidato alla presente selezione, dalla Commissione giudicatrice al momento dell'esame dei titoli sulla base di idonea documentazione presentata in fase di candidatura (art.4 comma 4 del Regolamento).

I vincitori in possesso di titolo di studio conseguito all'estero, che non siano in possesso del decreto di equipollenza, dovranno trasmettere **entro trenta giorni** dal decreto di approvazione degli atti della selezione e comunque all'atto della sottoscrizione del contratto, la traduzione ufficiale con dichiarazione di valore del titolo estero da parte delle competenti rappresentanze diplomatiche o consolari italiane nel Paese di provenienza, secondo le norme vigenti in materia. **Verrà disposta la decadenza dal diritto alla sottoscrizione del contratto nel caso in cui i documenti non pervengano entro il suddetto termine.**

Art.4

Presentazione della domanda e dei titoli

La domanda di partecipazione alla selezione, redatta secondo il fac-simile di cui all'**allegato 1**, dovrà essere inviata al Direttore del Dipartimento di Chimica 'Ugo Schiff' Via della Lastruccia, 3-13 esclusivamente per via telematica, secondo le seguenti modalità:

- a) con **posta certificata** al seguente indirizzo: chim@pec.unifi.it. I candidati a loro volta dovranno essere titolari di casella di posta elettronica certificata.
- b) con **E-mail** al seguente indirizzo: segreteria@chim.unifi.it

Per la compilazione della domanda è necessario avvalersi della sezione "Candidature on line":
<https://stlabtest.dinfo.unifi.it/beta/akademia-candidature/>

La domanda generata dovrà essere sottoscritta dal candidato e inviata, secondo una delle modalità sopra indicate, in formato PDF, unitamente a copia del documento di identità, in corso di validità.



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS

DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"

ECCELLENZA 2023-27

Ogni allegato alla domanda dovrà essere in formato PDF.

Nell'oggetto della mail dovrà essere riportata la dicitura: "Domanda per l'assegno di cui al Bando D.D. n _____ del _____".

La scadenza per la presentazione della domanda per la selezione è – pena l'esclusione - il giorno 10/02/2025 alle ore 13).

La data del colloquio è fissata **alle ore 16:30 del giorno 05/03/2025 presso il Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff", Via della Lastruccia 3-13, stanza 349.**

Tale indicazione vale a tutti gli effetti come notifica di convocazione.

Per sostenere il colloquio i candidati dovranno essere muniti di un documento di riconoscimento in corso di validità.

Il colloquio potrà essere svolto in modalità telematica ai sensi del art. 9 comma 5 del Regolamento di Ateneo di cui Decreto Rettorale N. 68910 (550) Anno 2020 Del 14/5/2020 inoltrando specifica richiesta all'indirizzo: reclutamento@chim.unifi.it.

Nella domanda il candidato deve indicare l'esatta denominazione della selezione cui intende partecipare, indicando l'area e la ricerca di cui al precedente art.1.

Deve inoltre dichiarare sotto la propria responsabilità, ai sensi del DPR n.445/2000, quanto segue:

- nome e cognome, codice fiscale, data e luogo di nascita e cittadinanza;
- luogo di residenza ed il recapito eletto ai fini della selezione (specificando CAP e recapito telefonico) nonché l'indirizzo mail per eventuali comunicazioni relative al presente bando;
- il titolo di studio richiesto, la data, l'Università e la Nazione presso cui è stato conseguito;
- di non essere destinatario di provvedimenti che riguardano l'applicazione di misure di prevenzione, di decisioni civili e di provvedimenti amministrativi iscritti nel casellario giudiziale ai sensi della vigente normativa, ovvero di aver riportato condanne penali (in relazione alle quali indicare la data della sentenza, l'autorità giudiziaria e la tipologia di giudizio/rito, le norme violate, il numero del procedimento e le sanzioni riportate);
- di non essere stato destituito, dispensato da precedente impiego presso una pubblica Amministrazione per persistente insufficiente rendimento ovvero non essere stato dichiarato decaduto da altro impiego statale ai sensi dell'art. 127 lettera d) del Testo Unico 10 gennaio 1957, n.3, per aver conseguito l'impiego mediante la produzione di documenti falsi o viziati da invalidità non sanabile, ovvero non essere cessato dal servizio a seguito di licenziamento disciplinare;
- di non essere a conoscenza di essere sottoposto a procedimenti penali, ovvero di avere procedimenti penali in corso. In tale ultimo caso indicare i reati per i quali è in corso il procedimento penale, l'Autorità e lo stato del procedimento;
- di godere dei diritti civili e politici;
- di non far parte del personale di ruolo delle Università e degli altri Enti indicati all'art.22, comma 1, Legge 240/2010;



- le eventuali titolarità di assegni di ricerca relative a precedenti periodi svolti ai sensi dell'art.22 della Legge 240/2010;
- di essere a conoscenza dei divieti di cumulo e delle incompatibilità previste nell'art.12 del presente bando;
- di impegnarsi a comunicare ogni eventuale cambiamento della propria residenza o del recapito.

Art.5

Documentazione da allegare alla domanda

Il candidato dovrà allegare alla domanda:

- copia di un documento di identità in corso di validità;
- il curriculum scientifico professionale redatto secondo il formato europeo in italiano o in inglese e sottoscritto dal candidato, debitamente documentato;
- i titoli scientifici e le pubblicazioni che il candidato ritenga utili, scansionati in formato pdf;
- l'autocertificazione relativa ai titoli accademici posseduti, sia quelli richiesti per la partecipazione alla selezione sia eventuali ulteriori titoli ritenuti utili ai fini della valutazione, con l'indicazione dell'istituzione che li ha rilasciati e della data di conseguimento (**Allegato 2**);
- per i titoli di studio conseguiti all'estero, se già dichiarati equipollenti, dovrà allegare la relativa certificazione; in caso contrario, dovrà allegare i certificati relativi ai titoli accademici conseguiti all'estero con traduzione ufficiale in lingua italiana;
- elenco sottoscritto e datato dei titoli, di eventuali attestati e di quant'altro dichiarato, nonché delle migliori pubblicazioni con tutti i riferimenti necessari per una loro corretta individuazione (**Allegato 3**).

Al fine di consentire il successivo inserimento dei dati relativi al contratto per assegnista nella banca dati MIUR, dovrà essere **compilata integralmente e sottoscritta dal candidato**, la Scheda CINECA (**Allegato 4**), il cui contenuto dovrà coincidere con quanto riportato nella domanda.

Tali dati, qualora il candidato risulti vincitore, confluiranno anche nel sito individuale MIUR <https://loginmiur.cineca.it>, al quale l'assegnista potrà accedere, previa registrazione.

L'Amministrazione non assume alcuna responsabilità derivante da inesatte indicazioni da parte del candidato o da eventuali disguidi tecnici/informatici nella presentazione della domanda.

Art.6

Esclusioni

Sono esclusi dalla partecipazione alla selezione i candidati:

- la cui domanda sia stata presentata oltre il termine previsto all'art.4;
- che abbiano omesso le dichiarazioni richieste circa il possesso dei requisiti per l'ammissione, ovvero che abbiano prodotto dichiarazioni, certificazioni e/o documentazioni false o non conformi;

SONO IN OGNI CASO ESCLUSI dalla procedura selettiva coloro che abbiano un rapporto di parentela ed affinità, fino al quarto grado compreso, con un docente appartenente al Dipartimento presso il quale si chiede di svolgere il Progetto di ricerca, ovvero con il Rettore, il Direttore Generale o un componente del Consiglio di Amministrazione dell'Ateneo, come previsto dall'art.18, comma 1, lett. c) della Legge 30 dicembre 2010, n.240, e secondo quanto previsto dall'art.4, comma 2, lettera c) del vigente Codice etico dell'Università degli Studi di Firenze, né con alcuno dei membri della Commissione Giudicatrice.



L'Amministrazione potrà adottare in qualsiasi momento, il provvedimento di esclusione nei casi di carenza dei requisiti richiesti.

L'Amministrazione procederà a controlli sulla veridicità del contenuto delle dichiarazioni sostitutive.

Art.7

Composizione della Commissione giudicatrice

La Commissione giudicatrice, nominata dopo la scadenza del bando con decreto del Direttore del Dipartimento di Chimica 'Ugo Schiff' pubblicato sull'Albo Ufficiale di Ateneo, sarà composta da tre membri scelti fra professori di ruolo e ricercatori appartenenti all'area scientifica in cui sarà svolta l'attività di ricerca.

La Commissione può essere integrata da un rappresentante dell'eventuale ente finanziatore.

Della commissione farà parte comunque il responsabile della ricerca con il quale il titolare dell'assegno dovrà collaborare.

Art.8

Valutazione dei titoli e colloquio

La Commissione valuta, ai soli fini dell'ammissione dei candidati, l'equivalenza dei titoli conseguiti all'estero che non siano già stati preventivamente riconosciuti in Italia secondo la legislazione vigente in materia.

La Commissione procederà quindi ad una valutazione comparativa dei candidati formulando un giudizio analiticamente motivato e identificando il nominativo del candidato che risulta vincitore. A parità di punteggio precede in graduatoria il candidato più giovane di età.

Per la valutazione dei candidati la Commissione disporrà di 100 punti, **60** dei quali da attribuire complessivamente ai titoli e al curriculum scientifico professionale del candidato ed i restanti **40** punti da riservare al colloquio.

La valutazione dei titoli verrà effettuata prima del colloquio.

La Commissione procederà preliminarmente alla attribuzione dei punteggi complessivi tra le voci valutabili, dei titoli e del curriculum, come di seguito indicato:

- titoli di studio, ulteriori rispetto ai requisiti richiesti per l'ammissione: fino ad un massimo di 5 punti;
- curriculum scientifico professionale: fino a d un massimo di 55 punti

La Commissione stabilisce il seguente punteggio minimo che i candidati devono conseguire nella valutazione dei titoli per poter essere ammessi al colloquio: **35** punti

La Commissione stabilisce il seguente punteggio minimo che i candidati devono conseguire nel colloquio per poter essere considerati idonei: **25** punti

La Commissione non procederà alla valutazione dei titoli, ove non siano indicati tutti gli elementi e i dati necessari ai fini della medesima.



Nell'ambito del colloquio la Commissione procederà ad accertare, tra le altre, la conoscenza della materia oggetto della valutazione, la chiarezza espositiva e la qualificazione del candidato a svolgere la ricerca oggetto del bando.

La Commissione trasmetterà al Direttore del Dipartimento il verbale con gli esiti della valutazione finale per l'approvazione degli atti.

Gli esiti della valutazione verranno resi pubblici sull'Albo ufficiale nel sito di Ateneo.

Dei risultati della selezione verrà data comunicazione personale ai selezionati a cura del Dipartimento. Avverso il decreto di approvazione degli atti è ammesso reclamo al Direttore dell'Dipartimento entro dieci giorni a decorrere dalla data di pubblicazione, ai sensi dell'art.12 del vigente Regolamento per il conferimento di assegni di ricerca.

Art.9

Assicurazione

Gli assegnisti di ricerca sono assicurati dall'Ateneo per la Responsabilità Civile contro Terzi e per gli Infortuni a decorrere dall'inizio dell'attività di ricerca senza oneri a loro carico (indicazioni sul sito internet di Ateneo alla pagina <http://www.unifi.it/vp-3514-schema-tipo-di-contratto-per-collaborazione-ad-attivita-di-ricerca.html#assicurazioni>).

Per gli assegni di sola ricerca la copertura assicurativa per la tutela giudiziaria è a carico del singolo assegnista.

Art.10

Contratto e documenti

Il Dipartimento provvede a convocare il vincitore della selezione al fine di procedere alla stipula del contratto che regoli la collaborazione all'attività di ricerca, previo accertamento sulla effettiva disponibilità dei fondi.

Al contratto deve essere allegata copia della polizza indicata nel precedente articolo.

I vincitori saranno tenuti, al momento della firma del contratto, a presentare i seguenti documenti in copia:

- documento di identità;
- codice fiscale;
- permesso di soggiorno per motivi compatibili con l'assegno (solo per i cittadini extracomunitari).

I cittadini non appartenenti all'Unione Europea dovranno essere in possesso di uno dei titoli di soggiorno previsti dalla vigente normativa in materia di immigrazione al fine della stipulazione del contratto per assegno di ricerca con l'Università degli Studi di Firenze. Pertanto, non si potrà procedere alla stipula del contratto qualora il vincitore non sia in possesso di idoneo titolo di soggiorno necessario ai fini della sottoscrizione. Qualora si verifichi tale condizione il suddetto candidato verrà dichiarato decaduto e si procederà alla stipula del contratto con altro candidato idoneo in ordine di graduatoria.

L'accertamento di tale condizione verrà effettuato al momento della sottoscrizione del contratto.

Inoltre, costituirà causa di risoluzione del contratto, la perdita del possesso del titolo di soggiorno necessario all'instaurazione e proseguimento dell'attività oggetto del contratto qualora detta perdita si verifichi dopo la stipulazione del medesimo.

- Il vincitore con titolo di studio estero, quale requisito di ammissibilità, non in possesso del decreto di equipollenza, e che non abbia trasmesso entro trenta giorni dal decreto di approvazione degli atti della selezione, la traduzione ufficiale con dichiarazione di valore del titolo estero da parte



delle competenti rappresentanze diplomatiche o consolari italiane nel Paese di provenienza, secondo le norme vigenti in materia, sarà dichiarato decaduto dal diritto alla sottoscrizione del contratto.

Art.11

Proprietà intellettuale

La gestione dei diritti di proprietà industriale e intellettuale derivanti dalle ricerche svolte dal personale universitario è disciplinata dall'art.65 del Codice della Proprietà Industriale (D. Lgs. n.30 del 2005 e s.m.i.) e dal "*Regolamento per la gestione dei diritti di proprietà industriale e intellettuale con riferimento alle attività di ricerca svolte da personale universitario*" emanato con D.R. n.82735 (526) del 08/05/2019, che prevede che, nel caso di ricerca vincolata, ossia finanziata in tutto o in parte da soggetti privati, ovvero realizzata nell'ambito di specifici progetti di ricerca finanziati da soggetti pubblici diversi dall'Università, il diritto di proprietà industriale eventualmente conseguito spetta all'Università, che rimane titolare degli eventuali diritti derivanti da invenzioni ottenute col contributo dei propri ricercatori, ai sensi dell'art.3 del suddetto Regolamento.

Ai sensi dell'articolo 1 co.3 del Regolamento il titolare dell'assegno, con la stipula del contratto, dichiara di accettare l'applicazione delle norme ivi indicate.

Art.12

Divieto di cumulo – Incompatibilità

L'assegno non può essere cumulato 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 e di ricerca.

Gli assegni per attività di ricerca non possono essere conferiti al personale di ruolo delle Università, delle istituzioni e degli enti pubblici di ricerca e sperimentazione, dell'Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico sostenibile (ENEA) e dell'Agenzia spaziale italiana (ASI), nonché delle istituzioni il cui diploma di perfezionamento scientifico è stato riconosciuto equipollente al titolo di dottore di ricerca ai sensi dell'articolo 74, quarto comma, del decreto del Presidente della Repubblica 11 luglio 1980, n.382.

Il personale dipendente in servizio, anche part time o a tempo determinato, presso enti pubblici o soggetti privati diversi rispetto a quelli indicati al punto precedente, può essere titolare di assegno di ricerca a condizione di essere collocato in aspettativa senza assegni per tutta la durata del contratto, ovvero di sospensione del rapporto di lavoro privato.

La titolarità dell'assegno non è compatibile con la partecipazione a corsi di laurea, laurea specialistica o magistrale, master, dottorato di ricerca con borsa o specializzazione medica, in Italia o all'estero.

Il titolare dell'assegno non può essere in rapporto di parentela ed affinità, fino al quarto grado compreso, con un docente appartenente al Dipartimento presso il quale si chiede di svolgere il Progetto di ricerca, ovvero con il Rettore, il Direttore Generale o un componente del Consiglio di Amministrazione dell'Ateneo, come previsto dall'art.18, comma 1, lett. c) della Legge 30 dicembre 2010, n.240, e secondo quanto previsto dall'art.4, comma 2, lettera c) del vigente Codice etico dell'Università degli Studi di Firenze, né con alcuno dei membri della Commissione Giudicatrice di cui all'art.6 del presente bando.

Il titolare di assegno di ricerca può svolgere attività di lavoro autonomo solo previa autorizzazione del Consiglio dell'Dipartimento, su parere motivato del Responsabile scientifico dell'assegno, previa verifica che tale attività sia:

- a. compatibile con l'esercizio dell'attività di ricerca prevista per l'assegno;
- b. non pregiudizievole per lo svolgimento delle attività di ricerca;



c. non portatrice di conflitto di interessi con la specifica attività di ricerca svolta; tenendo conto anche delle regole di rendicontazione previste dall'ente finanziatore.

Art.13

Sospensione del contratto

L'attività di ricerca deve essere sospesa per maternità. In tale ipotesi trovano applicazione le disposizioni di cui al decreto del Ministro del lavoro e della previdenza sociale 12 luglio 2007, pubblicato nella Gazzetta Ufficiale n.247 del 23 ottobre 2007 e s.m.i. Il periodo di sospensione obbligatoria per maternità viene recuperato alla naturale scadenza del contratto secondo quanto previsto dalla normativa vigente.

L'attività di ricerca può essere sospesa per malattia grave o per gravi motivi familiari e in tal caso i periodi di sospensione possono essere recuperati al termine della naturale scadenza del contratto, previo accordo con il docente responsabile e nel rispetto dei limiti imposti dal finanziamento a disposizione.

Durante il periodo di astensione obbligatoria per maternità, l'indennità corrisposta dall'INPS, o da altra cassa previdenziale, è integrata fino a concorrenza dell'intero importo dell'assegno su fondi a carico dell'Ateneo.

Nel caso di congedo per maternità, di congedo per malattia e nelle altre fattispecie di astensione si fa riferimento a quanto previsto all'art.22 comma 6 della Legge 240 del 30/12/2010.

In materia di congedo per malattia trova applicazione l'articolo 1, comma 788, della legge 27 dicembre 2006, n.296, e successive modificazioni.

Il provvedimento di sospensione è disposto con decreto del Direttore del Dipartimento.

Art.14

Risoluzione del contratto

Qualora l'assegnista non prosegua l'attività prevista dal programma di ricerca senza giustificato motivo o si renda responsabile di gravi o ripetute mancanze, su motivata richiesta del Responsabile della ricerca e con delibera del Consiglio di Dipartimento, può essere disposta la risoluzione del contratto ai sensi degli artt. 1453 e ss. del c.c.

Il provvedimento di risoluzione è disposto con decreto del Direttore del Dipartimento.

Art.15

Recesso del titolare dell'assegno di ricerca

Il titolare dell'assegno ha facoltà di recedere dal rapporto, dandone preavviso al Direttore del Dipartimento e al responsabile del progetto di ricerca almeno **quindici** giorni prima.

La mancata comunicazione comporta la trattenuta del corrispettivo rapportata al periodo di mancato preavviso.

Art.16

Frequenza corsi dottorato di ricerca

Il titolare di assegno di ricerca può frequentare, anche in soprannumero e senza diritto alla borsa di studio, i corsi di dottorato di ricerca, fermo restando il superamento delle prove di ammissione e, se previsto, il pagamento del contributo per l'accesso ai corsi.



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS
DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"
ECCCELLENZA 2023-27

Art.17

Disposizioni in materia fiscale e previdenziale

Si applicano agli assegni di ricerca, in materia fiscale, le disposizioni di cui all'art.4 della legge 13 agosto 1984, n.476, e successive modificazioni ed integrazioni, e in materia previdenziale, quelle di cui all'art.2, commi 26 e seguenti, della legge 8 agosto 1995, n.335, e successive modificazioni ed integrazioni.

Art.18

Trattamento dei dati personali

I candidati sono invitati a prendere visione dell' "Informativa per il trattamento dei dati personali di soggetti interessati a partecipare a procedure di reclutamento del personale o a procedure di selezione per l'ammissione a corsi a numero programmato o per il conferimento di assegni di ricerca, borse di studio, incarichi di collaborazione e/o insegnamento." Consultabile all'indirizzo:

https://www.unifi.it/upload/sub/protezionedati/Informativa_SELEZIONI.pdf

Le domande e i documenti prodotti dai candidati costituiscono "documenti amministrativi" rispetto ai quali, salvo casi eccezionali, deve essere esclusa l'esigenza di riservatezza. Tali atti, una volta acquisiti alla procedura concorsuale, escono dalla sfera personale dei partecipanti che, pertanto, non assumono la veste di contro interessati nel giudizio volto all'accesso agli atti della procedura da parte di altro soggetto. Saranno in ogni caso rispettate le disposizioni di cui al Regolamento Generale sulla Protezione dei dati Personali (Regolamento UE 2016/679 del Parlamento Europeo e del Consiglio del 27 aprile 2016 (GDPR), relativo alla protezione delle persone fisiche con riguardo al trattamento dei Dati Personali, nonché alla libera circolazione di tali dati, pubblicato sulla GUUE del 04 maggio 2016.

Art.19

Responsabile del procedimento

Il responsabile del procedimento è la Dott.ssa Elisa Zuri, Via della Lastruccia, 3-13 - 50019 – Sesto Fiorentino, tel 0554573442, e-mail elisa.zuri@unifi.it , pec chim@pec.unifi.it .

Art. 20

Norme finali e pubblicazione

Per quanto non previsto nel presente bando, si fa riferimento alle vigenti disposizioni legislative regolamentari in materia.

Il bando sarà pubblicato sull'Albo Ufficiale dell'Università degli Studi di Firenze, sul sito internet: <https://www.unifi.it/vp-391-assegni-di-ricerca.html>, sul sito del Ministero della Ricerca e sul sito Euraxess dell'Unione Europea.

Sesto Fiorentino,

IL DIRETTORE DEL DIPARTIMENTO

Prof. Stefano Menichetti



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS
DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"

ECCELLENZA 2023-27

ASSEGNO DI RICERCA

Titolo: Design High Throughput di Nanografeni open-shell per applicazioni di quantum computing attraverso metodi ab initio

Title: Ab Initio Design through High Throughput Methods of open-shell Nanographenes for Quantum Computing Applications

DESCRIZIONE ATTIVITA' DI RICERCA

Descrizione: Il ricercatore lavorerà sulla tematica del progetto 'iPAWNS-In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates' finanziato nell'ambito dell' Avviso 2022-2023 (FIS2). Capire come controllare l'interazione di scambio magnetico attraverso l'applicazione di un campo elettrico in materiali basati su nanografeni open-shell aprire la strada al calcolo quantistico basato su molecole paramagnetiche. L'attività di ricerca verterà sullo sviluppo di metodi ab initio per modellizzare le proprietà elettroniche e magnetiche degli NGS, e alla ottimizzazione di protocolli high-throughput per la simulazione di un elevato numero di sistemi molecolari mediante software di chimica quantistica. Il ricercatore dovrà quindi sviluppare metodologie per i) generare nuove strutture e ii) automatizzare il calcolo delle proprietà magnetiche di interesse, in particolare l'interazione di scambio. Sarà necessaria l'integrazione di approcci post-Hartree Fock (post HF) e teoria del funzionale densità (DFT), insieme a tecniche avanzate per modellizzare gli accoppiamenti spin-elettrici. Verranno utilizzate approssimazioni isolate e periodiche per derivare i parametri dell'hamiltoniano di spin, in particolare le interazioni di scambio. Il database generato sarà poi utilizzato per allenare modelli AI predittivi per prevedere e generare nuovi sistemi con le proprietà magnetiche desiderate. Il ricercatore avrà l'opportunità di partecipare a tutte le fasi di ricerca, venendo così esposto ad un contesto interdisciplinare. In particolare potrà partecipare allo sviluppo di modelli di deep learning predittivi per prevedere rapidamente il comportamento delle nuove strutture NGS, e alla creazione di modelli di deep learning generativi per progettare geometrie NGS ottimizzate per il massimo accoppiamento spin-elettrico.

Description: The researcher will work on the topic of the project 'iPAWNS-In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates' funded under the Call 2022-2023 (FIS2). Understanding how to control the magnetic exchange interaction through the application of an electric field in open-shell nanographene-based materials would pave the way for quantum computing based on paramagnetic



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS

DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"

ECCELLENZA 2023-27

molecules. The research activity will focus on the development of ab initio methods to model the electronic and magnetic properties of NGS, and on the optimization of high-throughput protocols for the simulation of a large number of molecular systems using quantum chemistry software. The researcher will therefore have to develop methodologies to i) generate new structures and ii) automate the computation of the magnetic properties of interest, in particular the exchange interaction. The integration of post-Hartree Fock (post-HF) and density functional theory (DFT) approaches will be required, together with advanced techniques to model spin-electric couplings. Isolated and periodic approximations will be used to derive the spin Hamiltonian parameters, in particular the exchange interactions. The generated database will then be used to train predictive AI models to predict and generate new systems with the desired magnetic properties. The researcher will have the opportunity to participate in all research phases, thus being exposed to an interdisciplinary context. In particular, he/she will be able to participate in the development of predictive deep learning models to rapidly predict the behavior of new NGS structures, and in the creation of generative deep learning models to design NGS geometries optimized for maximum spin-electric coupling.

*f.to Responsabile scientifico
Dr. Matteo Briganti*



ALLEGATO 1

FAC-SIMILE DELLA DOMANDA DI AMMISSIONE

Al Direttore
del Dipartimento di Chimica 'Ugo Schiff'
Via della Lastruccia, 3-13
50019 Sesto Fiorentino

Il/La sottoscritto/a chiede di partecipare alla selezione di cui al bando emesso con Decreto del Direttore n. del per l'attribuzione di n. 1 Assegno di ricerca per le esigenze del Programma di Ricerca: Design High Throughput di Nanografeni open-shell per applicazioni di quantum computing attraverso metodi ab initio dell'Area Scientifica presso il Dipartimento di Chimica 'Ugo Schiff'.

Consapevole che ai sensi degli artt.75 e 76 del 28/12/00 n.445, in caso di dichiarazioni mendaci, falsità negli atti o uso di atti falsi, incorrerà nelle sanzioni penali richiamate e decadrà immediatamente dalla eventuale attribuzione dell'assegno di ricerca

DICHIARA

Ai sensi degli artt.19, 46 e 47 del D.P.R. 445/2000:

Cognome Nome

Di essere nato/a a.....(provincia di.....)
il

Di essere residente a.....(provincia di.....)
via.....CAP.....

con recapito agli effetti del concorso qualora diverso dalla residenza:

città.....(provincia di.....)
via.....CAP.....

n. tel/cell.....

codice fiscale.....e-mail

di possedere la cittadinanza.....



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS
DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"

ECCELLENZA 2023-27



Dichiara inoltre

di **possedere:**

- il Diploma di laurea ai sensi del Vecchio Ordinamento in....., conseguito in data.....presso l'Università di..... con voto.....
- la Laurea specialistica ex D.M.509/99 e successive modificazioni e integrazioni appartenente alla Classe...../S in....., conseguito in data.....presso l'Università di..... con voto.....
- la Laurea magistrale ex D.M.270/04 appartenente alla Classe LM-..... in....., conseguito in data.....presso l'Università di..... con voto.....
- il seguente titolo di studio estero: conseguito in data.....presso l'Università di(.....) con voto.....

- di **essere iscritto/a** al Dottorato di ricerca in (ciclo.....) presso l'Università di Iniziato in data..... che terminerà in data..... () con borsa () senza borsa
- di **possedere il titolo di Dottore di ricerca/PhD** in conseguito in data.....presso l'Università di..... ovvero la discussione della tesi di dottorato si svolgerà in data antecedente alla procedura di valutazione dei titoli da parte della Commissione (specificare data prevista discussione tesi)
- di **possedere il titolo di Specializzazione** in conseguito in data.....presso l'Università di.....
- di essere stato/a titolare di assegno di ricerca (indicare per ogni titolarità di Assegno sede universitaria e relativo periodo)
dal...../...../..... al/...../.....presso
dal...../...../..... al/...../.....presso
dal...../...../..... al/...../.....presso
dal...../...../..... al/...../.....presso
e di non superare col presente assegno di ricerca il limite dei 6 anni complessivi stabiliti all'art.6, comma 2 bis della Legge 27/2/2015, n.11;
- di non essere stato/a precedentemente titolare di assegno di ricerca;
- di essere in possesso dei seguenti ulteriori titoli di studio e/o professionali (*indicare tutti i dati necessari per una eventuale verifica da parte della struttura*):
.....
.....
.....

- di non essere destinatario/a di provvedimenti che riguardano l'applicazione di misure di prevenzione, di decisioni civili e di provvedimenti amministrativi iscritti nel casellario giudiziale ai sensi della vigente normativa;
ovvero



- di aver riportato condanne penali (in relazione alle quali indicare la data della sentenza, l'autorità giudiziaria e la tipologia di giudizio/rito, le norme violate, il numero del procedimento e le sanzioni riportate);
- di non essere stato/a destituito/a, dispensato/a da precedente impiego presso una pubblica Amministrazione per persistente insufficiente rendimento ovvero non essere stato/a dichiarato/a decaduto/a da altro impiego statale ai sensi dell'art. 127 lettera d) del Testo Unico 10 gennaio 1957, n.3, per aver conseguito l'impiego mediante la produzione di documenti falsi o viziati da invalidità non sanabile, ovvero non essere cessato/a dal servizio a seguito di licenziamento disciplinare;
- di non essere a conoscenza di essere sottoposto/a a procedimenti penali;
ovvero
- di avere procedimenti penali in corso. In tale ultimo caso indicare i reati per i quali è in corso il procedimento penale, l'Autorità e lo stato del procedimento;
- di godere dei diritti civili e politici;
- di non far parte del personale di ruolo delle Università e degli altri Enti indicati all'art.22, comma 1, Legge 240/2010;
- di essere a conoscenza dei divieti di cumulo e delle incompatibilità previste nell'art.12 del presente bando;
- di impegnarsi a comunicare ogni eventuale cambiamento della propria residenza o del recapito.

Il/La sottoscritto/a dichiara di aver preso atto della "Informativa per il trattamento dei dati personali di soggetti interessati a partecipare a procedure di reclutamento del personale o a procedure di selezione per l'ammissione a corsi a numero programmato o per il conferimento di assegni di ricerca, borse di studio, incarichi di collaborazione e/o insegnamento."

Consultabile all'indirizzo: https://www.unifi.it/upload/sub/protezionedati/Informativa_SELEZIONI.pdf

Data,

_____ Firma

Allegare copia del documento di identità



**Dichiarazione sostitutiva di atto di notorietà
Resa ai sensi degli artt.19 e 47 del DPR 28 dicembre 2000, n.445**

Il/La sottoscritto/a
nato/ail.....
Residente a..... Via.....n°.....

Consapevole che ai sensi degli artt.75 e 76 del DPR 28/12/00, n.445,in caso di dichiarazioni mendaci, falsità negli atti o uso di atti falsi, incorrerà nelle sanzioni penali richiamate e decadrà immediatamente dalla eventuale attribuzione dell'assegno di ricerca:

DICHIARA

che le fotocopie sottoelencate sono conformi all'originale:

- 1)
- 2)
- 3)
- 4)
- 5)
- 6)
- 7)
- 8)
- 9)
- 10)

Data,

Firma



ALLEGATO 3

ELENCO DEGLI ALLEGATI ALLA DOMANDA

Il/La sottoscritto/a (cognome e nome).....
nato/a a.....(provincia di.....) il
residente a.....(provincia di.....)

con recapito agli effetti del concorso:
città.....(provincia di.....)
via.....n.....CAP.....
tel.

ALLEGA

alla presente domanda quanto segue:

- 1)
- 2)
- 3)
- 4)
- 5)
- 6)
- 7)
- 8)
- 9)
- 10)

Data,

Firma



Scheda CINECA per Contratti di Assegni di Ricerca

(I DATI DI SEGUITO INSERITI DOVRANNO CORRISPONDERE A QUELLI INSERITI NELLA DOMANDA DI PARTECIPAZIONE)

DATI ANAGRAFICI e CONTATTI

Codice Fiscale (*scrivere chiaro*) _____

Cognome _____ Nome _____

Sesso _____ Data di nascita ____/____/____ Comune di Nascita _____

Prov. di Nascita _____ Cittadinanza _____

E-MAIL _____ CELL. _____

INDIRIZZI

RESIDENZA: Via _____ n. _____ CAP _____

Località _____ Comune _____ Prov. _____

DOMICILIO (RIFERIMENTO) (*indicare solo se diverso dall'indirizzo di residenza*)

Via _____ n. _____ CAP _____

Località _____ Comune _____ Prov. _____

DOMICILIO FISCALE (*indicare solo se diverso dall'indirizzo di residenza*)

Via _____ n. _____ CAP _____

Località _____ Comune _____ Prov. _____

TITOLI DI STUDIO CONSEGUITI:

(...) Titolo estero _____

() Laurea V.O. _____

() Laurea Specialistica N.O. classe ____/S (_____)

() Laurea Magistrale N.O. classe ____-M (_____)

conseguita presso l'Università di _____

In data _____ (A.A. ____/____) con Voto _____

() Specializzaz. in _____ data _____

A.A. ____/____ Università di _____

() Dottorato di Ricerca in _____

conseguito in data _____ presso l'Università: _____

Ciclo _____ Data inizio _____ Data fine _____ durata in mesi _____



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

DICUS
DIPARTIMENTO DI CHIMICA
"UGO SCHIFF"
ECCCELLENZA 2023-27

Borsa NO () oppure SI () dal ___ / ___ / ___ al ___ / ___ / ___ n. mesi _____

ISCRIZIONE ALL'ALBO DELL'ORDINE PROFESSIONALE

Della Provincia di _____ Via/Piazza _____

DATI CONTRATTO

Struttura di afferenza: Chimica 'Ugo Schiff'

Estremi del bando: Decreto del Direttore n. del _____

Durata in mesi: 12 **Data inizio contratto (gg/mm/aaaa):** 01/04/2025

Responsabile della ricerca: Dr. Matteo Briganti

Titolo della Ricerca: Design High Throughput di Nanografeni open-shell per applicazioni di quantum computing attraverso metodi ab initio

Settore di riferimento: CHEM-03/A

Settori aggiuntivi (eventuali) _____

Data,

Firma



BANDO TOTALE CARICO

THE DIRECTOR

- HAVING REGARD TO the Law n. 240 of 30 December 2010, art. 22 and subsequent amendments and additions;
- HAVING REGARD TO the Decree-Law n. 192 of 31 December 2014, converted into Law n. 11 of 27 February 2015;
- HAVING REGARD TO the Law n. 476 of 13 August 1984 and subsequent amendments;
- HAVING REGARD TO the Law n. 335 of 8 August 1995 and subsequent amendments;
- HAVING REGARD TO the Law n. 127 of 15 May 1997 and subsequent amendments;
- HAVING REGARD TO the D.P.R. n. 445 of 28 December 2000;
- HAVING REGARD TO the Law n. 241 of 7 August 1990 and subsequent amendments;
- HAVING REGARD TO the Statute of the University of Florence;
- HAVING REGARD TO the current University Regulations for the implementation of the Law n. 241/1990 and subsequent amendments and additions, regarding access to administrative documents;
- HAVING REGARD TO the Legislative Decree n. 196 of 30 June 2003, Code on the protection of personal data;
- HAVING REGARD TO the current University Regulations on the protection of personal data;
- IN VIEW of the current Code of Ethics of the University of Florence;
- HAVING REGARD TO the D.R. n. 550 of 14 May 2020 of enactment of the "Regulations for the awarding of research grants" pursuant to art. 22 of the law n. 240 of 30 December 2010;
- HAVING REGARD TO the Decree of the Minister of Education, University and Research n. 102 of 9 March 2011 which establishes the gross annual minimum amount of research grants;
- HAVING REGARD TO the resolutions of the Academic Senate and of the Board of Directors respectively of 29 and 30 April 2020 which establish the maximum annual gross amount of research grants;
- RECALLED the President's decree of 09/04/2020 Ref. n. 56053 (Directory n. 471/2020) containing the Guidelines for carrying out the online competition procedures for research grants and scholarships and research;
- HAVING REGARD TO the resolution of the Council of the Department of Chimica 'Ugo Schiff' of 17/12/2024 which approves the opening of a new selection for research grants financed by Department for an amount of € 33.305,28 that will be borne by the project funds in its entirety on the project iPAWNS - FIS2 - In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates - CUP B53C24009560001
- VERIFIED by the Director of the Department the availability of sufficient funds in its budget to cover the amount granted by this Call for Applications;

DECREES

the issuing of the following:

Call for applications, evaluating qualifications and interview for n. 1 grant in the Area of Area Scientifica for carrying out research activities.

Art.1



Object of the Call

A selection is called, based on qualifications and interview, for n. 1 grant for carrying out research activities to be performed as indicated below:

ACADEMIC DISCIPLINE	RESEARCH PROGRAMME	CURRICULAR REQUISITES AND ACADEMIC TITLES AS PER ART.3 OF THE REGULATIONS	ADDRESS OF THE UNIT OF AFFILIATION
CHEM-03/A	<p>Title of the Research: Ab Initio Design through High Throughput Methods of open-shell Nanographenes for Quantum Computing Applications</p> <p>Scientific Supervisor: Dott. Matteo Briganti</p>	<ul style="list-style-type: none">• PhD in Physics• PhD in Chemical Science• PhD in Mathematical and Computer Sciences• PhD in Materials Science• PhD or equivalent qualification acquired abroad in a scientific field related to the subject of the call• Scientific-professional CV responding to the requisites	UGO-SCHIFF Via della Lastruccia, 3-13, 50019, Sesto Fiorentino (FI)

The detailed research programme is an integral part of this call.

Art.2

Awarding of the grant – Renewal

The selected candidate will be awarded a grant for the amount of € **27.000,00** per year, inclusive of the social security costs payable by the grant holder. The grant will be paid in deferred monthly instalments.

In the event that the winner is a researcher residing abroad and in possession of an Italian "Dottore di Ricerca (PhD) title, or other equivalent qualification obtained abroad, to the amount of the Grant will be added, by way of mobility allowance, the annual sum of € **6.000,00** inclusive of social security costs payable by the grant holder.

The grant is awarded for the duration of **12 months with effect from 01/04/2025** and may possibly be renewed to the same person for a maximum of **six** years overall, as regulated by art. 22 of Law 240/2010 and subsequent amendments, with the exception of the period in which the grant was received in connection with the research doctorate, within the maximum limit of the legal duration of the PhD programme.

For the purposes of calculating the maximum duration, the periods spent on maternity leave or sick leave are not counted according to the provisions of current legislation.

In the event of renunciation or revocation, the places made available can be assigned to candidates placed in a useful position in the ranking for a period of not less than 12 months and compatibly with the available resources.

The renewal, at the same conditions of the original contract, is decided by the Director of the Department upon request by the Scientific Supervisor. The renewal is subject to the positive evaluation of the activity carried out by the research manager, as well as to the actual budget availability.



Art.3

Requisites for admission to the selection

For participation in the selection, the following qualifications and curricular requirements are mandatory:

Requirements:

- PhD in Physics
- PhD in Chemical Science
- PhD in Mathematical and Computer Sciences
- PhD in Materials Science
- PhD or equivalent qualification acquired abroad in a scientific field related to the subject of the call

In case the prerequisite is a post-graduate degree only, a PhD will represent a preferential title for the purpose of awarding the grants.

The requirements must be met by the deadline of the Call for Applications.

All academic qualifications obtained abroad (degree, doctorate and any other qualifications) must, as a rule, be previously recognized in Italy according to current legislation on the matter. The equivalence of foreign qualifications, if not yet officially recognised, will be evaluated exclusively for the purposes of the admission of the candidate to this selection by the Admissions Board at the time of assessment of academic titles, based on the appropriate documentation (art.4 para.4).

Candidates in possession of an academic qualification obtained abroad, which has not yet been declared equivalent by the Italian authorities, must send the official translation with the "dichiarazione di valore" of the foreign qualification by the competent Italian diplomatic or consular representations in the country of origin, according to the regulations in force on the subject, within thirty days from the decree approving the selection results and in any case **within 30 days** from the decree approving the selection results and in any case at the time of signing the contract. **In case the documents are not received within this period the candidate will be not be eligible to sign the contract.**

Art.4

Submission of the application and the academic titles

The application for participation in the selection, drawn up in accordance with the facsimile set out in **Annex 1**, must be sent to the Director of the Department of Chimica 'Ugo Schiff' Via della Lastruccia, 3-13 exclusively via electronic means, according to the following methods:

- a) by **certified email (PEC)** to the following address: chim@pec.unifi.it. The candidates in turn must have a certified PEC email as well.
- b) by **email** to the following address: segreteria@chim.unifi.it

To fill in the application, it is necessary to use the "Online applications" section:
<https://stlabtest.dinfo.unifi.it/beta/akademia-candidature/>



The generated application must be signed by the candidate and sent, according to one of the methods mentioned above, in PDF format together with a scan of a valid photo ID.

Please note: ALL documents must be in PDF format.

The subject line of the email must contain the following: “Application for the grant as announcement D.D. n _____ of _____”

The deadline for submitting the selection application is 10/02/2025 at 1 p.m. under penalty of exclusion for late submissions.

The interview will be held on **05/03/2025 at 4.30 p.m. at room 349, Department of Chemistry ‘Ugo Schiff’, Address: Via della Lastruccia, 3-13 Sesto Fiorentino (FI).**

The above information constitutes a formal and final convocation for the interview.

In order to be admitted to the interview all candidates must present a valid ID.

The interview may be conducted online in accordance with Article 9, paragraph 5 of the University Regulations as per Rectoral Decree No. 68910 (550) Year 2020 of 14/5/2020 by submitting a specific request to the following address: reclutamento@chim.unifi.it.

In the application letter the candidate must indicate the exact denomination of the Call they wish to apply to, indicating the Area and the Research project as per art.1.

They must furthermore declare under their responsibility, as provided for in DPR n. 445/2000, the following:

- name and surname, tax identification number (codice fiscale), date and place of birth; citizenship;
- residence and the address of the domicile chosen for the purposes of the selection (specifying the area code and telephone number) as well as the email address for any communications relating to this notice;
- the degree required, the date, the university and the country where it was obtained;
- that they do not currently have any pending administrative or criminal proceedings and, in case of past criminal or civil convictions, list all charges in detail (the date of the judgment, the judicial authority and the type of judgment, the violated rules, the number of proceedings and the penalties reported);
- that they have been dismissed, released from previous employment with a public administration for persistent insufficient performance and that they have never been discharged from other state employment pursuant to art. 127 letter d) of the Consolidated Law 10 January 1957, n. 3, for having obtained the employment through the production of false documents or formally defective, or not to be prevented from public service following disciplinary dismissal;
- that they are not aware of being subjected to criminal proceedings, or to have ongoing criminal proceedings. In the latter case, indicate the offenses for which the criminal proceedings are underway, the Authority and the status of the proceedings;
- that they enjoy civil and political rights;



- that they are not part of the permanent staff of the universities and other bodies indicated in art. 22, paragraph 1, Law n. 240/2010;
- if they are holders of research grants relating to previous periods carried out pursuant to art. 22 of Law 240/2010;
- that they are aware of the bans on accumulation and incompatibilities provided for in art.12 of this announcement;
- that they will promptly communicate any change of residence or address.

Art.5

Documents to be attached to the application

Candidates must attach to the application:

- scan of a valid ID;
- a scientific-professional CV in Italian or in English, using the European template. The CV must be signed and completed with all relevant documents and attachments;
- the scientific publications and articles in pdf format;
- a self-certification relating to the academic qualifications held, both those required for participation in the selection and any further qualifications deemed useful for the assessment, with an indication of the institution that issued them and the date it was awarded (**Annex 2**);
- for the qualification obtained abroad, if already declared equivalent, attach the relevant documentation; otherwise, attach a copy of the foreign qualification with a translation in Italian or English;
- signed and dated list of all attached titles, awards and certificates and any other document mentioned with all necessary information to retrieve them (**Annex 3**).

In order to allow the subsequent insertion of the data relating to the researcher contract in the MIUR database, the CINECA form (**Annex 4**) must be **completed in full and signed by the candidate**, the content of which must coincide with what is indicated in the application.

The data of the successful candidate will also merge into their individual profile inside the MIUR website <https://loginmiur.cineca.it>, to which the grant holder will have access, once registered.

The Administration cannot be held responsible of the consequences deriving from incorrect indications by the candidate or from any technical/IT issues in submitting the application.

Art.6

Exclusions

Candidates are excluded from participation in the selection when any of these situations occur:

- the application has been submitted after the deadline set out in art.4;
- the application has been submitted after the deadline set out in art. 4 they have not attached the required self-declarations regarding the possession of the admission requirements, or that they have produced false or non-compliant declarations, certifications and/or documentation;

The following candidates are NOT ALLOWED under any circumstances to take part to the selection procedure those who have a relationship of kinship and affinity, up to and including the fourth degree, with academic staff belonging to the Department where they are asked to carry out the Research Project, or with the President, the General Manager or a member of the University's Board of Directors, as required by art. 18, paragraph 1 letter c) of Law n. 240, and in accordance with art. 4, paragraph 2, letter c) of the current Code of Ethics of the University of Florence, or with any of the members of the Selection Board.

The Administration may enforce these exclusion measures at any time in all cases of lack of the required prerequisites.



The Administration will carry out checks on the truthfulness of the content of the substitute declarations.

Art.7

Composition of the Admissions Board

The Admissions Board, nominated following the deadline of the call with a decree from the Director of the Department of Chimica 'Ugo Schiff', published on the Official Register of the University, it will be composed of three members chosen from tenured professors and researchers belonging to the same scientific area in which the research will be carried out. The Board can be supplemented by a representative of the funding body, if applicable. In any case, the research manager whom the grant holder will collaborate with, will be a member of the Admissions Board.

Art.8

Evaluation of qualifications and interview

The Admissions Board will evaluate, for the sole purpose of candidates' admission to the selection, the equivalence of qualifications obtained abroad that have not yet been recognized in Italy according to the legislation in force on the matter.

The Admissions Board will then carry out a comparative evaluation of the candidates by formulating an analytically motivated judgment and identifying the name of the successful candidate. With the same score, the youngest candidate in the ranking precedes.

For the evaluation of the candidates, the Admissions Board will have 100 points, **60** of which to be attributed overall to the candidate's qualifications and scientific professional curriculum and the remaining **40** points to be reserved for the interview.

The evaluation of qualifications will be carried out before the interview.

The Admissions Board will proceed first thing with the assignment of the overall scores to the evaluable items, the qualifications and the curriculum, as indicated below:

- educational qualifications, additional to the requirements for admission: up to a maximum of 5 points
- professional scientific curriculum: up to a maximum of 55 points

The Admissions Board establishes the following minimum score that candidates must achieve in the evaluation of qualifications in order to be admitted to the interview: **35** points

The Admissions Board establishes the following minimum score that candidates must achieve in the interview in order to be considered suitable: **25** points

The Admissions Board will not proceed with the evaluation of the qualifications, unless all the elements and data necessary for such evaluation are indicated.

As part of the interview, the Admissions Board will proceed to ascertain, among other aspects, the knowledge of the field subject of the call, the clarity of presentation and the suitability of the candidate to carry out the research called for.

The Admissions Board results will send a report with the final evaluation to the Director of the Department for approval.



The results of the evaluation will be published on the University's Official Register.

The results of the selection will be communicated personally to the selected candidate(s) by the Department. Any complaint against the approval decree must be filed to the Director of the Department within ten days from the date of publication, in accordance with art. 12 the current Regulations for the assignment of research grants.

Art.9 Insurance

Research fellows are insured by the University for Civil Liability against Third Parties and for Accidents starting from the beginning of the research activity without charges against them (information on the University website on the http page: <http://www.unifi.it/vp-3514-schema-tipo-di-contratto-per-collaborazione-ad-attivita-di-ricerca.html#assicurazioni>).

Art.10 Contract and required documents

The Department will contact the successful candidate in order to sign a contract regulating collaboration in the research activity, after checking the actual availability of the funds.

To such contract must be attached a copy of the insurance policy as per previous article.

The successful candidates must, at the time of signing the contract submit copies of the following documents:

- a valid photo ID;
- tax identification number (codice fiscale);
- resident permit where it is indicated a reason consistent with the research grant (only for non-EU citizens).

Citizens of countries outside of the European Union must be in possession of one of the residence permits provided for by the current immigration legislation in order to sign the contract for research fellowship with the University of Florence. Therefore, it will not be possible to proceed with the stipulation of the contract if the winner is not in possession of a suitable residence permit. If this condition occurs, the aforementioned candidate will be declared lapsed and the contract will be offered to the next suitable candidate in the ranking.

The ascertainment of this condition will be made at the time of signing the contract.

Furthermore, even if the loss of possession of the residence permit occurs after the contract has been signed, such condition will constitute cause for its termination.

In case the candidate holds a foreign title as one of the prerequisites, and then fails to obtain by the competent Italian diplomatic or consular representations in the country of origin, and then submit within 30 days, the required legalisation and declaration of value of such academic title, he or she will be ineligible to sign the contract.

Art.11 Intellectual property

The management of industrial and intellectual property rights deriving from research carried out by university staff is governed by art. 65 of the Industrial Property Code (Legislative Decree n. 30 of 2005 and subsequent amendments) and by the *"Regulation for the management of industrial and intellectual property rights with reference to the research activities carried out by university staff"*



issued with D.R. n.82735 (526) of 08/05/2019, which provides that, in the case of bound research, i.e. funded in whole or in part by private entities, or carried out in the context of specific research projects funded by public entities other than University, the industrial property rights that may result belong to the University, which remains the owner of any rights deriving from inventions obtained with the contribution of its researchers, pursuant to art.3 of the aforementioned Regulations. Pursuant to art.1 para. 3 of the Regulations, the grant holder, with the stipulation of the contract, declares to accept the application of the rules indicated therein.

Art.12

Prohibition of cumulation – incompatibility

The grant cannot be combined with scholarships of any kind, except with those awarded by national or foreign institutions for the purpose of integrating training and research activities with stays abroad. Research grants cannot be awarded to permanent staff of universities, institutions and public research and experimentation bodies, the National Agency for New Technologies, Energy and Sustainable Economic Development (ENEA) and Italian Space Agency (ASI), as well as of institutions whose scientific specialization diploma has been recognized as equivalent to the title of research doctor pursuant to art.74, fourth paragraph, of the decree of the President of the Republic 11 July 1980, n.382.

Employees serving in public administrations or private entities other than those specified in the paragraph above, with full-time, part-time or fixed term contract, are entitled to hold a research grant on the condition that they be placed on leave without pay for the duration of the research project or that their private employment contract is put on hold.

The awarding of the grant is not compatible with participation in degree programmes of any level including specialist or professional master courses, PhD with scholarship or medical specialization, in Italy or abroad.

The holder of the grant cannot be in a relationship of kinship and affinity up to the fourth degree included with any academic belonging to the Department where the research is carried out, or with the President, the General Manager or a member of the University's Board of Directors, as required by art.18, paragraph 1, letter c) of Law n.240/2010, and in accordance with art.4, paragraph 2, letter c) of the current Code of Ethics of the University of Florence as well as with any member of the Admissions Board as per art.6 of this Call.

The research grant holder can carry out self-employed work only after authorization by the Department Council, having heard the motivated opinion of the scientific director of the grant, after verifying that this activity is:

- a. compatible with the research activity set out in the grant;
 - b. not prejudicial to the conduct of research activities;
 - c. not in conflict of interest with the specific research activity carried out;
- also taking into account the reporting rules set forth by the funding body.

Art.13

Suspension of the contract

The research activity must be suspended for maternity leave. In this case, the provisions of the decree of the Minister of Labour and Social Security 12 July 2007, published in the Official Journal n.247 of 23 October 2007 will apply.

The period of compulsory suspension for maternity will be recovered at the end of the natural expiry of the contract in accordance with the provisions of current legislation.

The research activity can be suspended for grave illness or for serious family reasons and also in this case, the suspension periods can be recovered at the end of the natural expiry of the contract, subject



to agreement with the academic in charge and in compliance with the limits imposed by the funds available.

During the period of compulsory maternity leave, the allowance paid by INPS, or by another social security fund, is integrated up to the full amount of the grant with monies paid by the University

In case of maternity or any other type of leave, reference is made to art.22 paragraph 6 of Law n.240/2010

Concerning sick leave, the law that applies is n.296, art.1, paragraph 788 and subsequent amendments and integrations.

The suspension measure is ruled by a decree from the Director of the Department where the research is conducted.

Art.14

Termination of the contract

If the researcher does not continue the activity foreseen by the research program without a justified reason or is responsible for serious or repeated shortcomings, at the motivated request of the Research Manager and with the resolution of the Council of the Department, the termination of the contract can be ordered, pursuant to art.1453 et seq. of the civil code.

The termination measure is ruled by a decree from the Director of the Department where the research is conducted.

Art.15

Withdrawal by the research grant holder

The grant holder has the right to withdraw from the research programme, giving a notice of at least **15 (fifteen)** days addressed to the Director of the Department and to the research project manager.

Failure to do so implies the withholding of the amount corresponding to the period of mandatory advance notice.

Art.16

Attending PhD courses

The research grant holder can attend, as an extra and without the right to any scholarship, PhD courses, provided that he/she passes the required admission tests and, if applicable, pays any fee connected to the courses.

Art.17

Tax and social security provisions

The provisions of Art.4 of the Law n.476 of 13 August 1984 and subsequent amendments and additions, apply to research grants regarding tax matters. As far as social security is concerned, the applicable law is n.335 of 8 August 1995, art.2, paragraphs 26 and following and subsequent amendments.

Art.18

Personal data processing

Candidates are invited to read the "Information for the processing of personal data of interested parties to participate in personnel recruitment procedures or selection procedures for admission to courses with a limited number or for the awarding of research grants, scholarships, collaborative and/or teaching assignments" available at:

https://www.unifi.it/upload/sub/protezionedati/Informativa_SELEZIONI.pdf

The application forms and documents produced by the candidates constitute "administrative documents" with respect to which, except in exceptional cases, the need for confidentiality must be



excluded. These documents, once acquired by the selection procedure, are no longer considered to be within the personal sphere of the participants who, therefore, do not take on the role of counter parties, in any claim to access the documents of the procedure by another party. In any case, the provisions of the GDPR (EU Regulation 2016/679 of the European Parliament and of the Council of 27 April 2016 published on the OJEU of 04 May 2016), relating to the protection of individuals with regard to the processing of Personal Data and the movement of such data, will be abided to.

Art.19

Procedure manager

The manager for this selection procedure is Ms Elisa Zuri, address Via della Lastruccia, 3-13 - 50019 - Sesto Fiorentino, ph. 0554573442, e-mail elisa.zuri@unifi.it, pec chim@pec.unifi.it

Art. 20

Final provisions and publication

For all matters not provided for in this announcement, reference is made to the current legislation in force.

The notice will be posted in the University's Official online Register, on: <https://www.unifi.it/vp-391-assegni-di-ricerca.html>, on the website of the Ministry of Education and Research (MIUR) and on the European Union's Euraxess website.

Sesto Fiorentino (FI),

THE DIRECTOR OF THE DEPARTMENT

Prof. Stefano Menichetti



RESEARCH GRANT

Title: Ab Initio Design through High Throughput Methods of open-shell Nanographenes for Quantum Computing Applications

Titolo: Design High Throughput di Nanografeni open-shell per applicazioni di quantum computing attraverso metodi ab initio

DESCRIPTION OF THE RESEARCH ACTIVITY

Description: The researcher will work on the topic of the project 'iPAWNS-In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates' funded under the Call 2022-2023 (FIS2). Understanding how to control the magnetic exchange interaction through the application of an electric field in open-shell nanographene-based materials would pave the way for quantum computing based on paramagnetic molecules. The research activity will focus on the development of ab initio methods to model the electronic and magnetic properties of NGS, and on the optimization of high-throughput protocols for the simulation of a large number of molecular systems using quantum chemistry software. The researcher will therefore have to develop methodologies to i) generate new structures and ii) automate the computation of the magnetic properties of interest, in particular the exchange interaction. The integration of post-Hartree Fock (post-HF) and density functional theory (DFT) approaches will be required, together with advanced techniques to model spin-electric couplings. Isolated and periodic approximations will be used to derive the spin Hamiltonian parameters, in particular the exchange interactions. The generated database will then be used to train predictive AI models to predict and generate new systems with the desired magnetic properties. The researcher will have the opportunity to participate in all research phases, thus being exposed to an interdisciplinary context. In particular, he/she will be able to participate in the development of predictive deep learning models to rapidly predict the behavior of new NGS structures, and in the creation of generative deep learning models to design NGS geometries optimized for maximum spin-electric coupling.

Descrizione: Il ricercatore lavorerà sulla tematica del progetto 'iPAWNS-In Silico Prototypes for Addressable and Scalable Molecular Quantum Gates' finanziato nell'ambito dell' Avviso 2022-2023 (FIS2). Capire come controllare l'interazione di scambio magnetico attraverso l'applicazione di un campo elettrico in materiali basati su nanografeni open-shell aprirebbe la strada al calcolo quantistico basato sulle molecole paramagnetiche. L'attività di ricerca verterà sullo sviluppo di metodi ab



inizio per modellizzare le proprietà elettroniche e magnetiche degli NGS, e alla ottimizzazione di protocolli high-throughput per la simulazione di un elevato numero di sistemi molecolari mediante software di chimica quantistica. Il ricercatore dovrà quindi sviluppare metodologie per i) generare nuove strutture e ii) automatizzare il calcolo delle proprietà magnetiche di interesse, in particolare l'interazione di scambio. Sarà necessaria l'integrazione di approcci post-Hartree Fock (post HF) e teoria del funzionale densità (DFT), insieme a tecniche avanzate per modellizzare gli accoppiamenti spin-elettrici. Verranno utilizzate approssimazioni isolate e periodiche per derivare i parametri dell'hamiltoniano di spin, in particolare le interazioni di scambio. Il database generato sarà poi utilizzato per allenare modelli AI predittivi per prevedere e generare nuovi sistemi con le proprietà magnetiche desiderate. Il ricercatore avrà l'opportunità di partecipare a tutte le fasi di ricerca, venendo così esposto ad un contesto interdisciplinare. In particolare potrà partecipare allo sviluppo di modelli di deep learning predittivi per prevedere rapidamente il comportamento delle nuove strutture NGS, e alla creazione di modelli di deep learning generativi per progettare geometrie NGS ottimizzate per il massimo accoppiamento spin-elettrico.

*f.to Scientific Supervisor
Dr. Matteo Briganti*

TEMPLATE OF APPLICATION FORM

To the Director
of the Department of Chimica 'Ugo Schiff
Via della Lastruccia, 3-13
50019 Sesto Fiorentino

I, the undersigned, request to participate in the selection referred to in the announcement issued by the Director's Decree n. of for the award of n. 1 research grant to join the Research Programme: Ab Initio Design through High Throughput Methods of open-shell Nanographenes for Quantum Computing Applications of the Area Area Scientifica at the Department of Chimica 'Ugo Schiff.

Aware that in accordance with articles 75 and 76 of 28/12/00 n.445, in the case of false declarations, false information in the documents or use of false documents, I will incur the penal sanctions referred to and will immediately lose the right to the research grant

I THEREFORE DECLARE

Pursuant to art.19, 46 and 47 of the D.P.R. n.445/2000:

Family name First name

Place of birth (town).....(province/state and country.....)

Date of birth

Permanent address (town).....

(province/state and country.....)

street name, n Zip code.....

Domicile during the research project duration, if different from permanent address:

(town).....

(province/state and country.....)

street name, n Zip code.....

cell. ph.....

Tax ID number (codice fiscale).....e-mail

Nationality.....

I also declare the following

- I **hold** the foreign university title (specify if undergraduate, post-grad, etc)....., in (specify academic field)..... at the University of..... Graduation date..... Final mark.....
- I **hold** an Italian post-graduate degree obtained prior to 1999 in.....at the University of..... Graduation date..... Final mark.....
- I **hold** an Italian post-graduate degree according to D.M. 509/99 Class...../S in.....at the University of..... Graduation date..... Final mark.....
- I **hold** an Italian post-graduate degree according to D.M. 270/04 Class LM-..... in.....at the University of..... Graduation date..... Final mark.....
And not to exceed with this research grant the limit of 6 years total established in Article 6, paragraph 2a of Law n. 11/2015;
- I **am enrolled in the PhD programme** in (cycle.....) at the University of
Date of commencement..... Ending on.....
() with grant () without grant
- I **hold a PhD title** in at the University of..... Graduation date..... OR – the discussion of my PhD thesis will be held before the date of the evaluation of the titles by the Admissions Board (specify the expected date of discussion of the thesis).....
- I **hold a Specialisation title** in Graduation date..... at the University of.....
- I **hold a research grant** (indicate for each grant the university of affiliation and related period)
from...../...../..... to/...../..... at
from...../...../..... to/...../..... at
from...../...../..... to/...../..... at
from...../...../..... to/...../.....at
And not to exceed with this research grant the limit of 6 years total established in Article 6, paragraph 2a of Law n. 11/2015;
- I have never received a research grant;
- I hold the following further academic and/or professional qualifications (*indicate all the data necessary for verification by the structure*):
.....
.....
.....
- I do not currently have any pending administrative, criminal or civil proceedings as per current legislation;
OR
- I have had past criminal convictions (list all charges with the date of the judgment, the judicial authority and the type of judgment, the violated rules, the number of proceedings and the penalties reported);
- that I have never been dismissed or released from previous employment with a public administration for persistent insufficient performance and that I have never been discharged from other state employment pursuant to art.127 letter d) of the Consolidated Law n.3/1957, for having obtained the employment through the production of false documents or formally defective; and that I have not been prevented from public service following disciplinary dismissal;
- that I am not aware of being subjected to criminal proceedings;
OR

- that I have ongoing criminal proceedings. In such case, indicate the offenses for which the criminal proceedings are underway, the Authority and the status of the proceedings;
- that I enjoy full civil and political rights;
- that I am not part of the permanent staff of the universities and other bodies indicated in art.22, paragraph 1, Law n.240/2010;
- that I am aware of the bans on accumulation and incompatibilities provided for in art.12 of this announcement;
- that I will communicate any change of residence or contact details.

I, the undersigned, declare that I am aware of the information for the processing of personal data of subjects willing to participate in selection procedures for staff recruitment, research grant/scholarship awarding or participation in restricted access courses and teaching or collaboration contracts. Such information can be consulted at this page:

https://www.unifi.it/upload/sub/protezionedati/Informativa_SELEZIONI.pdf

Date,

Signature

Attach a copy of your ID

**Declaration of affidavit
(Dichiarazione sostitutiva di atto di notorietà)
Given pursuant to art.19 and 47 of DPR n.445 of 28/12/2000**

I, the undersigned
Place of birth Date of Birth.....
Permanent address.....

Aware that pursuant to art.75 and 76 of DPR N.445 of 28/12/00, in the event of false declarations or use of false deeds, I will incur the criminal sanctions referred to and will immediately become ineligible for any assignment of the research grant:

I DECLARE

that all documents attached to the application and listed below are true copies of the originals in my possession:

- 1)
- 2)
- 3)
- 4)
- 5)
- 6)
- 7)
- 8)
- 9)
- 10)

Date,

Signature

LIST OF ATTACHMENTS

I, the undersigned, (family name and first name).....
Place of birth (town).....
(province/state and country.....)
Date of birth

Permanent address (town).....
(province/state and country.....)
street name, nZip code.....

Domicile during the research project duration, if different from permanent address:
(town).....
(province/state and country.....)
street name, nZip code.....

cell. ph.....

I hereby **ATTACH** to the application the following documents:

- 1)
- 2)
- 3)
- 4)
- 5)
- 6)
- 7)
- 8)
- 9)
- 10)

Date,

Signature

CINECA form for Research Grant Contracts

(the data provided below must be identical to those submitted in the call for application)

PERSONAL and CONTACT DETAILS

Tax Identification Number (Codice Fiscale) *(please write clearly and in block letters)*

Family name _____ First name _____

M/F _____ Date of birth (dd/mm/yyyy) ____/____/____ Place of birth (town, province, country) _____ Nationality _____

E-MAIL _____ CELL. PH. _____

ADDRESSES

PERMANENT ADDRESS:

(town) _____

(province/state and country) _____

(street name) _____ n. _____ ZIP CODE _____

DOMICILE: *(only if different from permanent address)*

(town) _____

(province/state and country) _____

(street name) _____ n. _____ ZIP CODE _____

FISCAL DOMICILE: *(only if different from permanent address)*

(town) _____

(province/state and country) _____

(street name) _____ n. _____ ZIP CODE _____

ACADEMIC TITLES:

(...) Foreign title _____

() Italian Laurea prior to 1999 _____

() Italian Laurea Specialistica DM 509/99. Class ____/S (_____)

() Italian Laurea Magistrale DM 270/04. Class LM-____ (_____)

obtained at the University of _____

Graduation date _____ (A.Y. ____/____) Final mark _____

() Specialisation title in _____ date _____

A.Y. ____/____ University of _____

() PhD in _____

Graduation date _____ at the University of: _____

Cycle _____ Date commencement _____ Date ending _____

months of duration _____

Grant NO () YES () from ___/___/___ to ___/___/___ n. months _____

PROFESSIONAL BOARD REGISTRATION N. _____

Board's name and address _____

CONTRACT DATA

Unit of affiliation: Chimica 'Ugo Schiff'

Public call data: Director's Decree n. of

Duration (months): 12 Contract's beginning date (dd/mm/yyyy): 01/04/2025

Research Supervisor/Manager: Dott. Matteo Briganti

Title of the research project: Ab Initio Design through High Throughput Methods of open-shell Nanographenes for Quantum Computing Applications

Academic discipline: CHEM-03/A

Further disciplines (if applicable) _____

Date,

Signature