

# Fotochimica e fotofisica computazionali

LOGO UNI/SCUOLA



UNIVERSITÀ  
DI SIENA  
1240

RICERCATORI

Prof. Luca De Vico

DIPARTIMENTO

Dipartimento di Biotecnologia,  
Chimica e Farmacia

LABORATORIO

## L'attività di ricerca



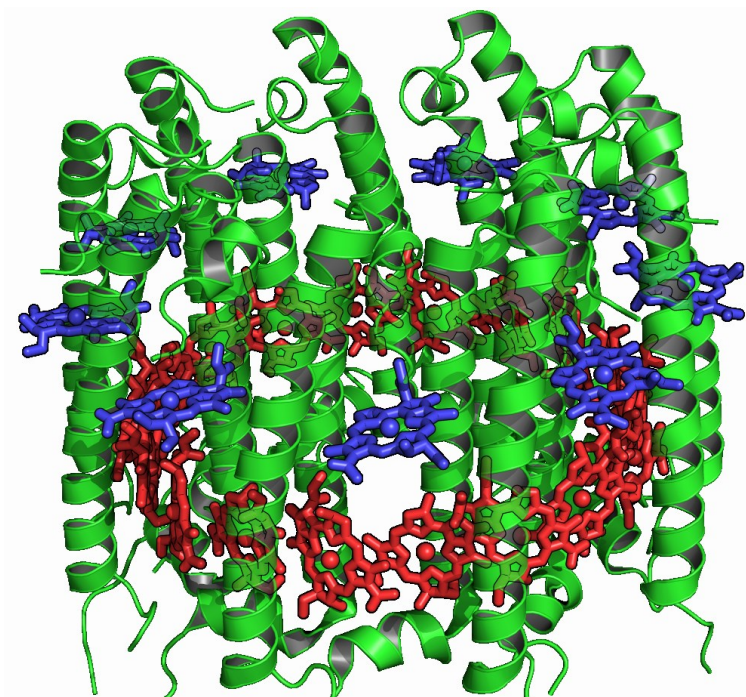
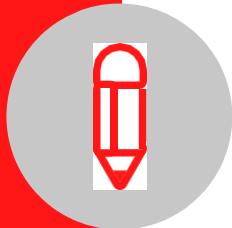
Breve descrizione dell'attività di ricerca.

L'attività di ricerca si incentra sulla simulazione di proprietà chimiche e fisiche delle molecole quando interagiscono con la luce: tali molecole sono chiamati cromofori. Ci interessiamo a processi di assorbimento (il colore di una sostanza), emissione (fluorescenza e fosforescenza), e foto-produzione di nuove specie chimiche. Inoltre, simuliamo anche processi di chemiluminescenza, come la luce delle lucciole.

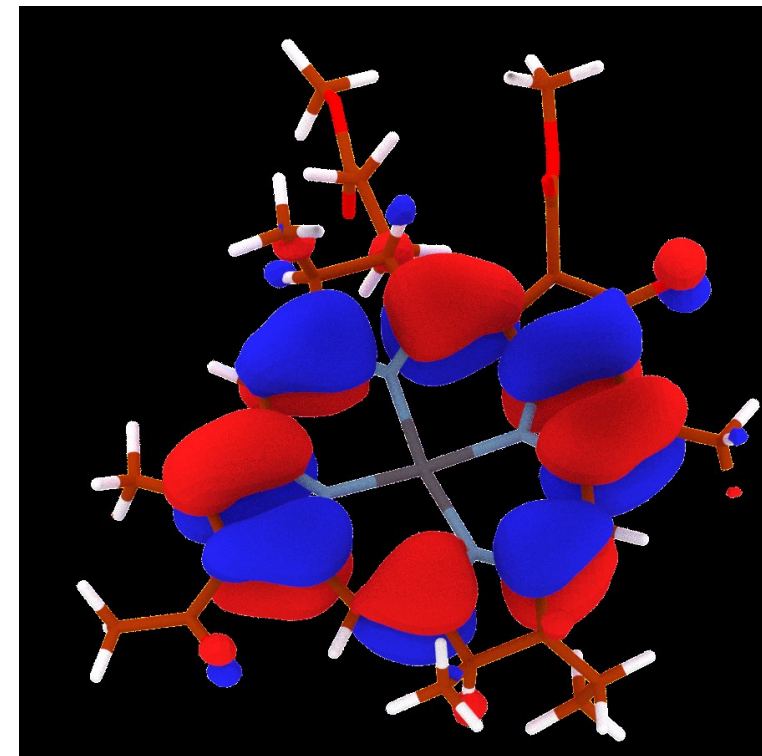
Il punto di forza del gruppo di ricerca è la capacità di utilizzare metodi computazionali estremamente accurati, spesso considerati troppo complessi per tali molecole.

Infine, ultimamente abbiamo sviluppato la capacità di applicare tali metodi anche ad aggregati di molecole. In tal modo, siamo in grado di valutare e predire come differenti geometrie e disposizioni relative possano essere utilizzati per modificare le proprietà di aggregati di cromofori.

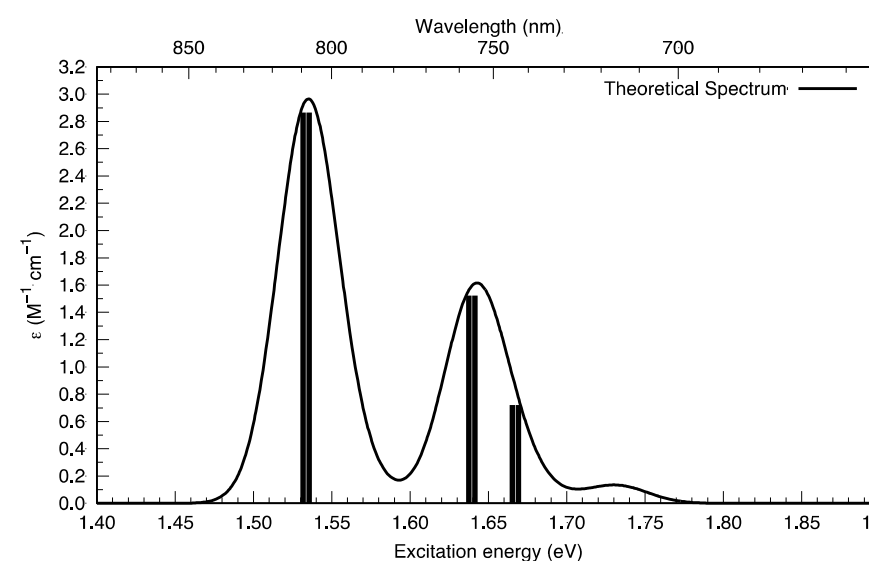
# Disegni e Immagini



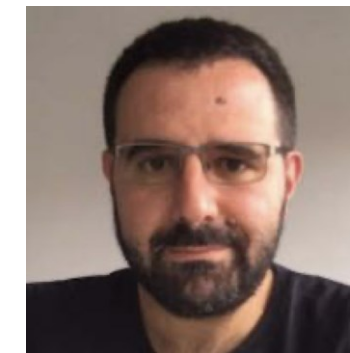
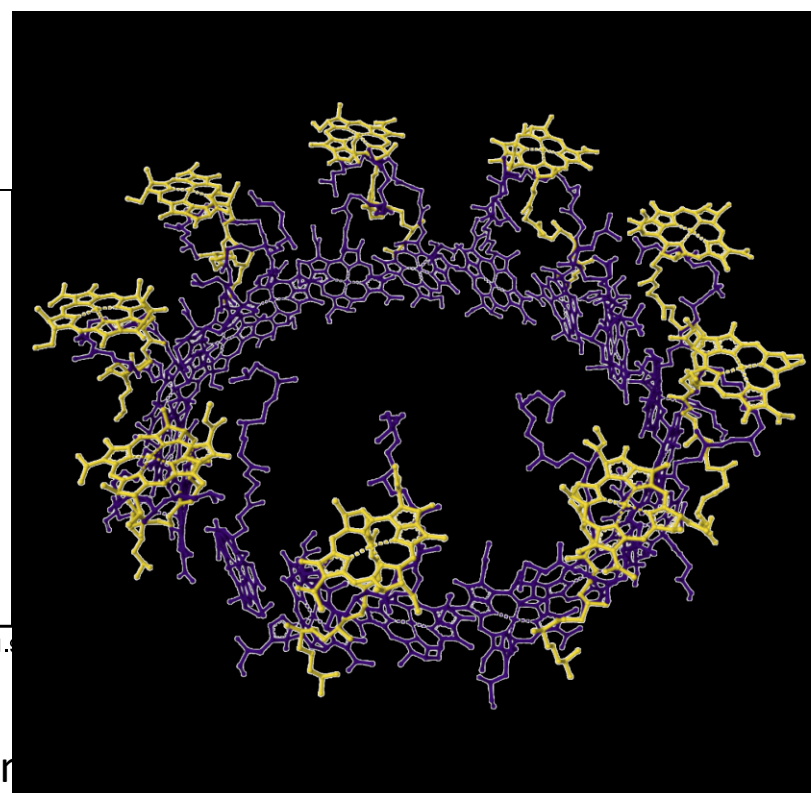
LH2 (light-harvesting complex 2): un esempio di un sistema complesso proteina-cromofori studiati nel nostro gruppo



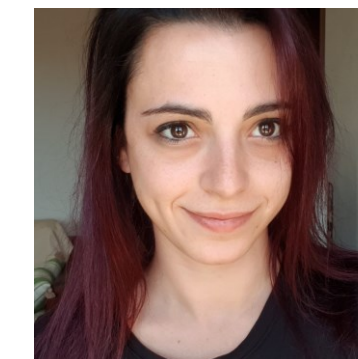
Rappresentazione di un cromoforo (una batterioclorofilla) e della sua natura quanto meccanica.



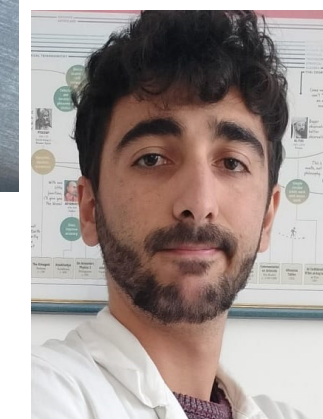
Simulazione dello spettro del sistema per individuare se e come i vari cromofori interagiscono tra loro e contribuiscano allo spettro finale



Prof. Luca De Vico. Leggere il codice QR per la mia pagina su ORCID

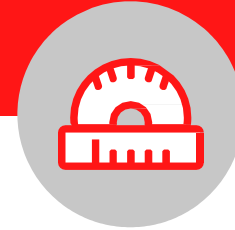


Il gruppo





## Strumenti, Tecnologie e Servizi



Utilizziamo le risorse di High-Performance Computing (HPC) disponibili nel dipartimento. Abbiamo a disposizione anche le risorse del centro di calcolo CINECA a cui accediamo sulla base di progetti competitivi.

Siamo parte del gruppo internazionale di sviluppo del programma di calcolo OpenMolcas ([www.openmolcas.org](http://www.openmolcas.org)), che fornisce gli strumenti più all'avanguardia per lo studio quanto meccanico delle proprietà foto chimiche e foto fisiche delle molecole. Abbiamo sia la capacità di utilizzare tutti gli strumenti disponibili in OpenMolcas, sia la possibilità di introdurre nuovi metodi se necessario per studiare nuove proprietà.

Possibili  
applicazioni e  
collaborazioni



Abbiamo al momento in corso una collaborazione di ricerca con l'azienda Aligned Bio AS ([alignedbio.com](https://alignedbio.com)) di Lund (Svezia). Forniamo una piattaforma per lo studio dei loro prodotti, ma non possiamo divulgare di più, al momento.

Per maggiori informazioni



## Ufficio di Trasferimento Tecnologico dell'Università di Siena

Sede: Banchi di Sotto 55, Siena

Sito web: <http://research.unisi.it>

E-mail: [ricerca@unisi.it](mailto:ricerca@unisi.it) - [liaison@unisi.it](mailto:liaison@unisi.it)

Per maggiori informazioni



## Ufficio Regionale di Trasferimento Tecnologico

Sede: Via Luigi Carlo Farini, 8 - 50121 Firenze, FI

E-mail: [urtt@regione.toscana.it](mailto:urtt@regione.toscana.it)

LOGO UNI/SCUOLA



**URttt**  
UFFICIO REGIONALE  
di Trasferimento Tecnologico