

ALLEGATO N. 2/A  
TITOLI E PUBBLICAZIONI VALUTABILI

**PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCURSALE 03/A2 (MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE) - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 (CHIMICA FISICA) - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1/2023 DEL 20/01/2023**

L'anno 2023, il giorno 28 del mese di Febbraio alle ore 14,30 si è riunita per via telematica (Meet), ognuno nella propria sede universitaria, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03/A2 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/02 (Chimica Fisica) - presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 21/2023, prot. n. 289 del 07.02.2023 e composta da:

- Prof. Franco Mazzei – professore ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Presidente)
- Prof.ssa Angela De Bonis – professore ordinario presso il Dipartimento di Scienze, Università degli Studi della Basilicata (Componente)
- Prof.ssa Emanuela Gatto - professore associato presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche dell'Università degli Studi di Roma Tor Vergata (Segretario)

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 14,30.

La Commissione prende atto dei titoli per i quali sia stata presentata idonea documentazione ai sensi dell'art. 3 del bando.

**CANDIDATO: CELESTE Arcangelo**

**VERIFICA TITOLI VALUTABILI:**

- 1) Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze e Tecnologie della Chimica e dei Materiali curriculum (XXXIV CICLO) IST. 2018, con orientamento di NANOCHEMISTRY conseguito il 24/03/2022 presso l'Università degli Studi di Genova titolo: "Design and characterization of doped Lithium Rich Layered Oxides for Lithium Ion Battery". (VALUTABILE)
- 2) Titoli di studio:
  - Laurea Triennale in Chimica conseguita in data 23/06/2015 presso l'Università degli Studi della Basilicata. (VALUTABILE)
  - Laurea Magistrale in SCIENZE CHIMICHE (LM-54 - Classe delle lauree

- magistrali in Scienze chimiche), conseguita in data 10/10/2017 presso l'Università degli Studi della Basilicata. (VALUTABILE)
- 3) Dal 16/01/2018 al 15/07/2018 e dal 16/07/2018 al 15/10/2018 collaboratore presso l'IIT con l'incarico di implementare la ricerca relativa allo sviluppo di materiali catodici ad elevata capacità specifica da utilizzare in dispositivi a litio nell'ambito del progetto Energy Storage ETCM034502. (VALUTABILE)
  - 4) Dal 01/11/2021 al 31/10/2022 ha Assegnista di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica della Sapienza Università di Roma. Responsabile Scientifico: Prof. Sergio Brutti. Titolo della ricerca: Studio materiali elettrodici per batterie aprotiche. (VALUTABILE)
  - 5) Dal 01/12/2022 ad oggi Assegnista di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica della Sapienza Università di Roma. Responsabile Scientifico: Prof.ssa Maria Assunta Navarra. Titolo della ricerca: Materiali elettropositivi ad alta capacità per batterie litio-ione. (VALUTABILE)
  - 6) 01/11/2020 – 31/03/2021 visiting PhD student presso il Department of Chemistry-Angstrom Laboratorrt, Uppsala University, Sweden. Responsabile Scientifico: Prof. Daniel Brandell. Progetto di Ricerca: Development of novel cathode materials for Li-ion batteries. (VALUTABILE)
  - 7) Partecipazione a corsi di perfezionamento post-lauream:
    - 26-30/11/2018: The International Winter School on Materials Characterisation by the Combined Analysis MAUD 2018 (Trento – Italia) (VALUTABILE)
    - 19-23/05/2019: International Spring School of Electrochemistry (ISSE) 2019 – Smart Material For and From Electrochemistry (Castellammare del Golfo (TP) – Italia) (VALUTABILE)
  - 8) Partecipazione a congressi e workshops
    - Presentazione Poster: "Ionic liquids based electrolytes for advanced cathode materials" Merck & Elsevier Young Chemists Symposium, Rimini, November 19-21 2018 (VALUTABILE)
    - Presentazione Orale: "Lithium rich transition metal oxides as high capacity positive electrode materials in Li-ion cells" Giornate dell'elettrochimica Italiana 2019, Padova, September 8-12 2019 (VALUTABILE)
    - Presentazione Orale: "Lithium-Rich layered oxides as a positive materials for Lithium-Ion Batteries" NanoInnovation 2020, Roma, September 15-18 2020 (VALUTABILE)
    - Presentazione Orale: "Investigation of the effect of Li- and Al- doping on electrochemical properties of Li-rich layered oxides" NanoInnovation 2021, Roma, September 21-24 2021 (VALUTABILE)
    - Presentazione Orale: "Lithium Rich Layered Oxides as cathode materials for Lithium Ion Batteries" First Symposium for YouNg Chemists: Innovation and Sustainability (SYNC), Roma, June 20-23, 2022 (VALUTABILE)
    - Presentazione Orale: "Investigation of the effect of Li- and Al- co-doping on electrochemical properties of Li-rich layered oxides" XLVIII National Congress of Physical Chemistry, Genova, July 04-07, 2022 (VALUTABILE)
    - Presentazione Orale: "Investigation of the effect of iron doping

- on electrochemical properties of Li-rich transition metal oxides” Giornate dell'elettrochimica Italiana 2022, Orvieto, September 11-15, 2022 (VALUTABILE)
- Presentazione Orale: “Structure and Doping of Lithium Rich Layered Oxides as a cathode material for Lithium Ion Batteries” 47th International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2023), DaytonaBeach January 22-27 2023 (VALUTABILE)
- 9) Partecipazione scientifica a progetti di ricerca
- Partecipante al progetto di ricerca: “Irreversible DEgradation of energy MAterials: from elementary reactions to mitigation strategies (IDEMA)”, Progetto Medio di Ateneo 2020 Sapienza Università di Roma. (VALUTABILE)
  - Partecipante al progetto di ricerca: “BAattery Health-state: Aging, Models and AbuSe (BAHAMAS)”, Progetto Medio di Ateneo 2022 Sapienza Università di Roma. (VALUTABILE)
  - Responsabile scientifico del progetto per avvio alla ricerca Università La Sapienza 2022 Fondi assegnati: 2.000 euro. Titolo: Synthesis and structural characterization of anion doped Lithium Rich Layered Oxides (VALUTABILE)
- 10) Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca
- Premio Semerano-Bando 2022 for the best PhD Thesis in Physical Chemistry, Società Chimica Italiana-Divisione di Chimica Fisica, 06/07/2022 (VALUTABILE)
  - Student and Young Professional Travel Grant, awarded by ACerS The Engineering Ceramics Division (VALUTABILE)
- 11) Titolarità di brevetti
- 2020 “Materiale di ossidi di metalli di transizione ricco di litio “ Italian Patent Application N. IT 102020000016966 (VALUTABILE)
  - 2021 “Li-Rich Transition Metal Oxides Material” PCT International Application N. PCT/IB2021/056279 (International Application of the corresponding Italian patent) (VALUTABILE)

#### **VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI:**

- 1) A. Celeste, L. Silvestri\*, M. Agostini, M. Sadd, S. Palumbo, J.K. Panda, A. Matic, V. Pellegrini, S. Brutti\*, Enhancement of Functional Properties of Liquid Electrolytes for Lithium-Ion Batteries by Addition of Pyrrolidinium-Based Ionic Liquids with Long Alkyl-Chains, Batter Supercaps. 3.10 (2020) 1059–1068. <https://doi.org/10.1002/batt.202000070>. IF:7.093 Citations:5 (VALUTABILE)
- 2) A. Celeste, M. Tuccillo, A. Santoni, P. Reale, S. Brutti\*, L. Silvestri\*, Exploring a Co-Free, Li-Rich Layered Oxide with Low Content of Nickel as a Positive Electrode for Li-Ion Battery, ACS Appl Energy Mater. 4.10 (2021) 11290–11297. <https://doi.org/10.1021/acsaem.1c02133>. IF: 6.959 Citations:8 (VALUTABILE)
- 3) A. Celeste, R. Brescia, G. Greco, P. Torelli, S. Mauri, L. Silvestri, V. Pellegrini, S. Brutti\*, Pushing Stoichiometries of Lithium-Rich Layered Oxides Beyond Their Limits, ACS Appl Energy Mater. 5.2 (2022) 1905–1913.

- <https://doi.org/10.1021/acsaem.1c03396>. IF: 6.959 Citations:3 (VALUTABILE)
- 4) M. Tuccillo, A. Costantini, A. Celeste, A.B.M. García, M. Pavone, A. Paolone, O. Palumbo, S. Brutti\*, NAl/Li Antisite Defects in the Li<sub>1.2</sub>Ni<sub>0.2</sub>Mn<sub>0.6</sub>O<sub>2</sub> Li-Rich Layered Oxide: A DFT Study, *Crystals* (Basel). 12.5 (2022) 723. <https://doi.org/10.3390/cryst12050723>. IF:2.67 Citations:1 (VALUTABILE)
- 5) M. Palluzzi, L. Silvestri, A. Celeste, M. Tuccillo, A. Latini, S. Brutti\*, Structural Degradation of O<sub>3</sub>- NaMnO<sub>2</sub> Positive Electrodes in Sodium-Ion Batteries, *Crystals* (Basel). 12.7 (2022) 885. <https://doi.org/10.3390/cryst12070885>. IF:2.67 Citations:1 (VALUTABILE)
- 6) A. Celeste, F. Girardi, L. Gigli, V. Pellegrini, L. Silvestri, S. Brutti\*, Impact of Overlithiation and Al doping on the battery performance of Li-rich layered oxide materials, *Electrochim Acta*. 428 (2022) 140737. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2022.140737>. IF:7.336 Citations:4 (VALUTABILE)
- 7) A. Celeste\*, R. Brescia, L. Gigli, J. Plaisier, V. Pellegrini, L. Silvestri, S. Brutti\*, Unravelling structural changes of the Li<sub>1.2</sub>Mn<sub>0.54</sub>Ni<sub>0.13</sub>Co<sub>0.13</sub>O<sub>2</sub> lattice upon cycling in lithium cell, *Materials Today Sustainability*. 21 (2023) 100277. <https://doi.org/10.1016/j.mtsust.2022.100277>. IF: 7.244 (VALUTABILE)
- 8) A. Celeste\*, M. Paolacci, P.G. Schiavi, S. Brutti, M.A. Navarra, L. Silvestri\*, Understanding the Impact of Fe-Doping on the Structure and Battery Performance of a Co-Free Li-Rich Layered Cathodes, *ChemElectroChem*. (2023). <https://doi.org/10.1002/celec.202201072>. IF:4.782 (VALUTABILE)
- 9) A. Laezza\*, A. Celeste, M. Curcio, R. Teghil, A. de Bonis, S. Brutti, A. Pepe, B. Bochicchio, Cellulose Nanocrystals as Additives in Electrospun Biocompatible Separators for Aprotic Lithium-Ion Batteries, *ACS Appl Polym Mater*. (2023). <https://doi.org/10.1021/acsaem.1c03396>. IF: 4.855 (VALUTABILE)
- 10) L. Silvestri, A. Celeste, M. Tuccillo, S. Brutti\*, Li-rich Layered Oxides: Structure and Doping Strategies to Enable Co-Poor/Co-Free Cathodes for Li-Ion Batteries, *Crystals*. 13.2 (2023) 204. <https://doi.org/10.3390/cryst13020204>. IF: 2.67 (VALUTABILE)

#### TESI DI DOTTORATO

La tesi di dottorato è stata allegata. È VALUTABILE

#### CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato è coautore di 10 pubblicazioni su riviste internazionali, di cui 6 come primo nome, 2 delle quali anche come corresponding author. Presenta 8 tra contributi orali (7) e 1 poster a convegni nazionali ed internazionali. Il candidato riporta (sorgente Scopus) un numero totale di citazioni 22, Numero medio di citazioni per pubblicazione 2,44; H-index 3. L'Impact Factor totale: 50,57 (Journal of Citation Report), mentre quello medio per pubblicazione è 5,057.

**CANDIDATA: SALMA Umme**

**VERIFICA TITOLI VALUTABILI**

1) Titolo di Dottore di Ricerca in SCIENZE CHIMICHE (XXX CICLO) conseguito il 21/12/2017 presso la Sapienza Università di Roma titolo: "Study of Ionic Liquid Solutions with X-Ray Diffraction, Thermodynamic and Theoretical Methods". (VALUTABILE)

2) Titoli di studio:

- Bachelor's of Education (B. Ed.) Bachelor of Education (B.Ed) in Science Group, (2013-2014) presso Allama Iqbal Open University, Islamabad (Pakistan) (VALUTABILE)
- Master of Philosophy (MPhil) in Chimica Fisica il 17/12/2013 presso il Department of Chemistry, University of Sargodha (Pakistan); (VALUTABILE)
- Master of Science (MSc) in Chemistry il 04/08/2010 presso il Department of Chemistry, Punjab University Lahore (Pakistan); (VALUTABILE)
- Bachelor of Science (BSc) in Natural Sciences il 31/07/2008 presso il University of Sargodha (Pakistan); (VALUTABILE)

3) 02/2022-11/2022: post-doctoral researcher at the Institute of Nanotechnology (NANOTEC) - CNR (Lecce, Italy). Responsabile Scientifico: Maria Serena Chiriaco. Titolo della Ricerca: "Prostate cancer: disentangling the relationships with tumor microenvironment to better model and target tumor progression (PRODIGIO)" (VALUTABILE)

4) Interruzione della carriera per Genitorialità: maternità e l'educazione dei figli dal 2018 al Dicembre 2021. (VALUTABILE)

5) September 2010 to April 2012: Lecturer of Chemistry at ITM College of Science and Technology, Sargodha (Pakistan) (VALUTABILE)

6) May 2012 to Oct. 2014 Lecturer of Chemistry and Academic Coordinator at Punjab College Sargodha (Pakistan) (VALUTABILE)

7) 01/03/2016-01/06/2016: Research experience as a Visiting Research Associateship at the School of Chemistry and Chemical Engineering, The Queen's University of Belfast, UK. Responsabile Scientifico: Andrew Doherty. Titolo della Ricerca: Synthesis, structural characterization, and electrochemistry of novel 2-hydroxy naphthoquinone-based redox-active ionic liquids. (VALUTABILE)

8) Partecipazione a congressi e workshops

- L. Gontrani, U. Salma, C. Sadun, R. Caminiti, "Halogen Bond in Liquid Acetonitriles: the First X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics Study", at Congresso DCTC 2015 (Divisione Chimica Teorica e Computazionale), 12-14 December, 2015, CNR, Rome, Italy. (VALUTABILE)
- U. Salma, R. Caminiti and L. Gontrani, "Effect of Water on the Nanostructure of Alkylammonium Based Ionic Liquids", Merck Young Chemists Symposium, October 25th-27th, 2016 Rimini, Italy. (VALUTABILE)
- Lorenzo Gontrani, Umme Salma and Ruggero Caminiti, "To swell or to shrink? Alkylammonium alkanoates plus molecular solvents." 10-14 September, 2017, Paestum, Italy. (VALUTABILE)

9) Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca

- Winner of international scholarship from "La Sapienza" University of Rome, Italy. (Rank-1) (VALUTABILE)
- Winner of PhD MOBILITY FELLOWSHIP 2016 "La Sapienza" University

- of Rome, Italy. (VALUTABILE)
  - Winner of merit scholarship during M.Sc. from University of Punjab,
  - Lahore (Pakistan). (VALUTABILE)
- 10) Certificate for The Control of Substances Hazardous to Health (COSHH) Assessor (for wet lab) rilasciato dalla The Knights of Safety™ Academy, UK 27/02/2022 (NON VALUTABILE)
- 11) Lettera di referenze del Prof. Ruggero Caminiti, Dipartimento di Chimica, Sapienza Università di Roma (NON VALUTABILE)
- 12) Lettera di referenze Dr Natalia Plenchkova, Research Impact Office, Queen's University of Belfast, UK (NON VALUTABILE)

#### **VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI:**

1. U. Salma\*, P. Ballirano, M. Usula, R. Caminiti, N. V. Plechkova, K. R. Seddon and L. Gontrani, "A new insight into the nanostructure of alkylammonium alkanooates based ionic liquids in water", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Volume 18, 11497-11502, 2016. Publisher: Royal Society of Chemistry. (IF: 4.449); Citations: 12). DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CP07953E> (VALUTABILE)
2. U. Salma\*, M. Usula, R. Caminiti, L. Gontrani, N. V. Plechkova, K. R. Seddon, "X- Ray and Molecular Dynamics Studies of Butylammoniu Butanoate- Water Binary Mixtures", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Volume 19, 1975-1981, 2017. Publisher: Royal Society of Chemistry. (IF: 4.449; Citations: 15). DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CP06860J> (VALUTABILE)
3. U. Salma, N. V. Plechkova, R. Caminiti, L. Gontrani, "The Opposite Effect of Water and N-Methyl- 2-Pyrrolidone Cosolvents on The Nanostructural Organization of Ethylammonium Butanoate Ionic Liquid: a Small and Wide Angle X-Ray Scattering and Molecular Dynamics Simulations Study", *J Phys Chem B.*, Volume 121, 6399–6407, 2017. Publisher: American Chemical Society (IF: 3.146; Citations: 03). DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b01837> (VALUTABILE)
4. L. Gontrani, R. Caminiti, U. Salma, M. Campetella, "A Structural and Theoretical Study of the Alkylammonium Nitrates Forefather: Liquid Methylammonium Nitrate", *Chemical Physics Letters*, Volume 684, 304-309, 2017. Publisher: North-Holland. (IF: 2.328; Citations: 07). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.07.017> (VALUTABILE)
5. R. Abro, N. Kiran, S. Ahmed, A. Muhammad, A. S. Jatoy, S. A. Mazari, U. Salma, N. V. Plechkova., "Extractive Desulfurization of Fuel Oils using Deep Eutectic Solvents: A Comprehensive Review", *Journal of Environmental Chemical Engineering*, Volume 10, Issue 3, 107369, 2022. Publisher: Elsevier. (IF: 7.968; Citations: 10). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jece.2022.107369> (VALUTABILE)

#### **TESI DI DOTTORATO**

La tesi di dottorato è stata allegata. È VALUTABILE

#### **CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:**

La candidata presenta 5 pubblicazioni su riviste internazionali, di cui 3 come primo nome, 2 delle quali anche come corresponding author. Presenta, inoltre, tre partecipazioni a Congressi, senza indicare la tipologia: poster o comunicazione orale.

La candidata dichiara i seguenti parametri bibliometrici:

- numero complessivo di lavori su banche dati internazionali riconosciute per l'abilitazione scientifica nazionale 08 (banca dati di riferimento Google Scholar);
- indice di Hirsch 4 (banca dati di riferimento Google Scholar);
- numero totale delle citazioni 47 (banca dati di riferimento Google Scholar);
- numero medio di citazioni per pubblicazione 9.4 (banca dati di riferimento Scopus);
- «impact factor» totale e «impact factor» medio per pubblicazione, calcolati in relazione all'anno della pubblicazione 22.34 e 4.468 (banca dati di riferimento Scopus).

C'è da rilevare che dati riportati sono stati ottenuti su una banca dati (Google Scholar) che non è quella indicata nel bando, cioè Scopus. Il calcolo dell'impact factor è riferito a Scopus, dove non viene fornito questo dato, ma dovrebbe essere riferito a Journal of Citation Report.

La Commissione viene sciolta alle ore 18.00.

Letto, approvato e sottoscritto.

Firma del Commissari

Prof. Franco Mazzei

Prof.ssa Angela De Bonis

Prof.ssa Emanuela Gatto