



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" BANDITA CON D.D. N. 15/2020 DEL 09 OTTOBRE 2020

VERBALE N. 2 – SEDUTA VALUTAZIONE TITOLI

L'anno 2021, il giorno 9 del mese di Febbraio alle ore 9,30 si è riunita per via telematica (Google Meet), 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. 67/2020 Prot. 2279 del 18/12/2020 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 Concetta Giancola – professore ordinario presso il Dipartimento di Farmacia, Università di Napoli Federico II (Componente)
- Prof. Gianfranco Bocchinfuso - 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 9,30.

Il Presidente informa la Commissione di aver acquisito dal responsabile del procedimento l'elenco dei candidati alla procedura selettiva e la documentazione, in formato elettronico, trasmessa dagli stessi.

La Commissione giudicatrice dichiara sotto la propria responsabilità che tra i componenti della Commissione ed i candidati non sussistono rapporti di coniugio, di parentela o di affinità, fino al quarto grado compreso, né altre situazioni di incompatibilità ai sensi degli artt. 51 e 52 del Codice di Procedura Civile e dell'art. 18, primo comma, lett. b) e c), della legge 30 dicembre 2010, n. 240.

I candidati alla procedura selettiva risultano essere i seguenti (in ordine alfabetico):

1. CAMPETELLA Marco
2. MIGLIORATI Valentina

La Commissione procede quindi alla valutazione preliminare dei candidati con motivato giudizio sui titoli, sul curriculum e sulla produzione scientifica, secondo i criteri definiti dal D.M. n. 243/2011 e fissati in dettaglio nell'allegato 1 del verbale della seduta del 29/01/20021.

L'elenco dei titoli e la valutazione preliminare di ciascun candidato vengono riportati in dettaglio nell'Allegato 2, Allegato 2A, Allegato 2B, che costituiscono



parte integrante del presente verbale.

Sulla base della valutazione dei titoli e della produzione scientifica dei candidati, sono ammessi a sostenere il colloquio pubblico i Dottori: [vedi art. 7, comma 2, Regolamento RTDA]

1. CAMPETELLA Marco
2. MIGLIORATI Valentina

Il colloquio verrà espletato il giorno 4 Marzo alle ore 14,30 in videoconferenza tramite lo strumento "Google Meet" in base alla circolare Prot. N. 0030092 del 20/04/2020 in merito alle disposizioni di svolgimento delle procedure concorsuali. Link "Google Meet": <https://meet.google.com/iyn-eymp-fcy>

Il Presidente invita il Responsabile del procedimento a comunicare ai suddetti candidati la data di convocazione per lo svolgimento del colloquio in forma seminariale previsto dal bando. I candidati potranno utilizzare per il colloquio, in videoconferenza tramite lo strumento "Google Meet", una presentazione in formato Power Point o equivalenti per una durata complessiva di 20 minuti.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 18,30.

Letto, approvato e sottoscritto.

Firma del Commissari

Prof. Franco Mazzei

Prof.ssa Concetta Giancola

Prof. Gianfranco Bocchinfuso



ALLEGATO N. 2 AL VERBALE N. 2

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" BANDITA CON D.D. N. 15/2020 DEL 09 OTTOBRE 2020

L'anno 2021, il giorno 9 del mese di Febbraio alle ore 9,30 si è riunita per via telematica (Google Meet), 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. 67/2020 Prot. 2279 del 18/12/2020 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 Concetta Giancola – professore ordinario presso il Dipartimento di Farmacia, Università di Napoli Federico II (Componente)
- Prof. Gianfranco Bocchinfuso - 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 09,30

La Commissione, accertato che i criteri generali fissati nella precedente riunione sono stati resi pubblici per più di sette giorni, inizia la verifica dei nomi dei candidati, tenendo conto dell'elenco fornito dal Responsabile del procedimento.

La Commissione, presa visione dell'elenco dei candidati alla procedura selettiva, verifica che non ci sono esclusioni né rinunce sino ad ora pervenute, prende atto che i candidati da valutare ai fini della procedura selettiva sono n. 2 e precisamente:

1. CAMPETELLA Marco
2. MIGLIORATI Valentina

La Commissione, quindi, procede ad esaminare le domande di partecipazione alla procedura selettiva presentate dai candidati con i titoli allegati e le pubblicazioni.

Procede poi ad elencare analiticamente i Titoli.

Procede poi ad elencare analiticamente le Pubblicazioni trasmesse dai candidati.

La Commissione elenca, per ogni candidato, i titoli e le pubblicazioni valutabili (allegato 2/A).



CANDIDATO: CAMPETELLA Marco

ELENCO TITOLI:

Sebbene non sia stato inviato l'elenco dei titoli ritenuti utili ai fini della selezione, in base alla visione del curriculum vitae è stato possibile individuare i seguenti titoli:

- 1) Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze dei Materiali conseguito il 10/2014 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". "Structural studies of ionic liquids by means of X-ray and theoretical methods".
- 2) Titoli di studio:
 - Laurea Triennale in Chimica conseguita 9/2004 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
 - Laurea Magistrale in Chimica conseguita 9/2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
 - Laurea triennale in Fisica conseguita 9/2009 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
 - Laurea Magistrale in Fisica conseguita 9/2011 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
- 3) Dal 07/2015 ad oggi titolare dei seguenti assegni di ricerca o posizione equivalente:
 - Presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Pisa. Responsabile scientifico: Prof.ssa Benedetta Minnucci. Progetti di ricerca: "Simulations of Excitonic Absorption and Circular Dichroism Spectra of Proteins and Light harvesting systems" – Characterization of a robust and automated protocol for the derivation of sound force field parameters, suitable for condensed-phase classical simulations. (07/2015-07/2016).
 - Presso il Centre national de la recherche scientifique (CNRS) di Parigi. Responsabile scientifico: Dr. Ilaria Ciofini. Progetto di ricerca: Study on the behaviour of the particle-hole distance varying both the acceptor donor distance (in push-pull systems) and the functionals in TDDFT calculations. (09/2016-08/2018)
 - Presso il Centre national de la recherche scientifique (CNRS) di Parigi. Responsabile scientifico: Dr Matteo Calandra. Progetto di ricerca: Characterization of electronic and structural properties of different kinds of 2D materials. (09/2018-08/2020)
 - Presso il Centre national de la recherche scientifique (CNRS) di Parigi. Responsabile scientifico: Dr Paolo Barone. Progetto di ricerca: characterization of electronic and structural properties of different kinds of 1D materials. (09/2020-)
- 4) Partecipazione a corsi di perfezionamento post-lauream:
 - May 2012 CECAM Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) tutorial: understanding condensed matter and molecular physics (Lausanne, Switzerland)
 - June 2012 School in Introduction to HPC: high performance computing, CASPUR (Rome, Italy)
 - February 2013 School in Introduction to HPC: parallel computing, CASPUR



(Rome, Italy)

- August 2015 CECAM 4 th CP2K Tutorial (Lausanne, Switzerland)
 - September 2017 European Summer School in Quantum Chemistry (Torre Normanna, Italy)
 - January 2020 Computational School on Electronic Excitations in Novel Materials Using the Yambo Code (Trieste, Italy)
- 5) Partecipazione a congressi e workshops
- «ACS» (Boston, U.S.A.). Presentazione orale dal titolo: "Tuned quantification of particle-hole distance in charge-transfer excitations: A revised version of the DCT index" (04/2018).
 - «TheoBio» (San Sebastian, Spain). Presentazione orale: "Charge Transfer Excitations in TDDFT: A Ghost-Hunter Index" (03/2017).
 - «CMS» (Warwick, U.K.). Presentazione orale: "Ghost states in TDDFT : a reliable descriptor for their detection" (03/2017).
 - «ESCS» (Paris, France). Presentazione orale: "Excitonic Approach in Complex Light Harvesting Systems" (11/2016).
 - «ACS» (San Diego, U.S.A.). Presentazione orale: "Simulation of the electronic spectra of LH2 complex of bacteria through a polarizable QM/MM approach" (04/2016).
 - «Winter Modeling» (Modena, Italy). Presentazione di un Poster: "Static and Dynamical Properties of Oxirane : an Experimental and Theoretical Approach" (03/2013).
- 6) Attività didattica
- 2018: Insegnamento di un Mini-corso per gli studenti di dottorato: "Principi di Meccanica Quantistica", presso ENSCP Chimie ParisTech.
 - a.a. 2013-2014: Assistenza per i corsi di Chimica e Fisica per la laurea triennale in Scienze Naturali, Università di Roma "La Sapienza".
 - Assistenza nella realizzazione di una tesi Magistrale in Chimica (2015) e di una tesi di Dottorato in Scienze Chimiche (2019)
- 7) Attività di Peer Review
- Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche internazionali: the Journal of Chemical Theory and Computation, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Physical Chemistry Chemical Physics, Computational and Theoretical Chemistry, The European Physical Journal Plus, International Journal of Quantum Chemistry, Molecular Physics.

CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina

ELENCO TITOLI:

- 1) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Fisica (settore concorsuale 03/A2 - Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche).
Data conseguimento abilitazione: 03/08/2017. In allegato il giudizio della commissione nazionale.
- 2) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica



- Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici). Data conseguimento abilitazione: 01/12/2014. In allegato il giudizio della commissione nazionale.
- 3) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici). Data conseguimento abilitazione: 07/08/2018. In allegato il giudizio della commissione nazionale.
 - 4) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Fondamenti Chimici delle Tecnologie (settore concorsuale 03/B2). Data conseguimento abilitazione: 25/10/2018.
 - 5) Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito il 17/12/2009 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Titolo della tesi: A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration. In allegato la tesi di dottorato.
 - 6) Laurea in Chimica conseguita il 21/9/2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (voto 110/110 e lode).
 - 7) Dal 1/3/2010 – 28/2/2018: titolare dei seguenti Assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Responsabile scientifico: Prof.ssa Paola D'Angelo.
 - Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati" (01/03/2010-28/02/2015).
 - Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi" (01/03/2015-28/02/2018).
 - Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi statistici e chemiometrici per l'ottimizzazione di biomarcatori di latte vaccino e bufalino" (01/03/2018-31/08/2019 (Nei periodi 27/6/2018-26/7/2018 e 8/1/2019-8/6/2019 il contratto è stato sospeso rispettivamente per gravidanza a rischio e maternità)).
 - Progetto di ricerca: "Una nuova classe di solventi verdi: i solventi eutettici profondi" (01/12/2019-attualmente in corso).
 - 8) Partecipazione a corsi di perfezionamento post-lauream:
 - Partecipazione al corso: "Understanding Molecular Simulations". 7-18 Gennaio 2008. Università di Amsterdam. Amsterdam.
 - Partecipazione al corso: "Ottimizzazione di codici scientifico-tecnici." 17-19 Marzo 2009. CASPUR. Roma.
 - Partecipazione al corso: "Introduzione all'HPC: calcolo parallelo". 12-14 Maggio 2009. CASPUR. Roma.
 - Partecipazione al corso: "Scripting in Python". 25-28 Ottobre 2011. CASPUR. Roma.
 - 9) Partecipazione a congressi e workshops
 - "Terzo Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Zn 2+ ion hydration under pressure". 18-19 Giugno 2008. Università "La Sapienza". Roma.
 - "XXXIII 5-10 Luglio 2009. Sorrento. Congresso Nazionale della società Chimica Italiana".
 - "14th International Conference on X-ray Absorption Fine structure



(XAFS14)". Presentazione di un contributo orale dal titolo "Ion Hydration in high-density water". 26-31 Luglio 2009. Camerino.

- "CECAM workshop on Aqueous Solvation of Ions". Presentazione di un contributo orale dal titolo "A combined theoretical and experimental investigation of ion hydration". 22-24 Febbraio 2010. CECAM-ETHZ, Zurigo, Svizzera.
- "International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2" Presentazione di un poster dal titolo: "A combined Molecular Dynamics and X-ray diffraction study of protic ionic liquid/water mixtures" 09-11 Giugno 2010. Roma.
- "Quarto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Studio strutturale e dinamico della coordinazione in acqua dello ione Br⁻". 16-17 Giugno 2010. Università "La Sapienza". Roma.
- "Quinto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Effetto degli ioni Zn(2+) e Hg(2+) sulla struttura dell'acqua". 12-13 Giugno 2012. Università "La Sapienza". Roma.
- "Sesto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Le funzioni di Wannier: uno sguardo su strutture e dinamiche nascoste". 17-18 Giugno 2014. Università "La Sapienza". Roma.
- Workshop: "Computer Simulations for Condensed Phase Systems: From Correlated Electrons to Novel Materials" 4-6 Maggio 2015. CNR. Roma.
- Invited Speaker alla Conferenza internazionale "the EMN Bangkok Meeting on Materials 2015". Presentazione di una comunicazione orale su invito dal titolo: "Local Order and Long Range Correlations in Imidazolium Halide Ionic Liquids". 10-13 Novembre 2015, Bangkok, Thailandia.
- "III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana". Presentazione di una comunicazione orale dal titolo: "The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs". 14-16 Dicembre 2015, Sede Centrale del CNR, Roma.
- "XXIV SILS (Società italiana luce di Sinctrotrone) meeting 2016" Presentazione di un poster dal titolo: "Unraveling the coordination geometry of Sc 3+ in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule". 21-23 Settembre 2016. Università di Bari. Bari.
- "IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana". Presentazione di un poster dal titolo: "Sc 3+ in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule". 3-5 Ottobre 2016. Scuola Normale Superiore. Pisa.
- "XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana". Presentazione di un contributo orale dal titolo: "Unraveling the solvation properties of Lanthanide (3+) ions: a combined Molecular Dynamics and XAS approach". 1-4 Luglio 2019. Università "La Sapienza". Roma.

10) Attività didattica

- a.a. 2020/2021 (attualmente in corso)
Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con



Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza".

- a.a. 2019/2020
Corso di dottorato "Metodi computazionali per lo studio di sistemi molecolari complessi" per gli studenti del corso di dottorato in Scienze Chimiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".
- 2012-2018: Assistenza nella Supervisione di tesi di Laurea magistrale e triennale in chimica e nella supervisione di dottorandi di ricerca (in particolare di due dottorandi di ricerca, 5 lauree magistrali e 8 lauree triennali).
- a.a. 2007/2008, 2008/2009, 2009/2010, 2010/2011, 2011/2012, 2012/2013, 2013/2014, 2014/2015, 2015/2016, 2017/2018: Lezioni di Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica – argomento del corso: Meccanica Quantistica) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".
- a.a. 2006/2007: Contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico integrative, propedeutiche e di recupero presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".

11) Attività di Peer Review

Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche internazionali dell'American Chemical Society, dell'American Institute of Physics, e della Royal Society of Chemistry, tra le quali: Inorganic Chemistry, the Journal of Physical Chemistry, the Journal of Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Molecular Liquids, Catalysis Science & Technology, Nanoscale e Journal of Chemical Information and Modeling.

12) Partecipazione scientifica a progetti di ricerca

- Responsabile scientifico del progetto per avvio alla ricerca Università La Sapienza 2015prot. C26N159PNB. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "Unraveling halide hydration: the interplay of Car-Parrinello Molecular Dynamics and EXAFS spectroscopy."
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA. Anno: 2013-2014 - grant HP10CCQEUQ . Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in Ionic Liquids." 1070000 ore calcolo assegnate.
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2015 - grant HP10C2Q0F3. Titolo: "Structure and properties of geminal dicationic Ionic Liquids/water mixtures." 1100000 ore calcolo assegnate.
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2017 - grant HP10CZTDIS. Titolo: "Unraveling the peculiar properties of a new generation of green solvents: the deep eutectic solvents" 2100000 ore calcolo assegnate.
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2018-2019 - grant HP10CGVY3L. Titolo: "Deep eutectic solvents: a combined theoretical and experimental study of the structural and dynamic properties" 400000 ore calcolo assegnate.
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2010 - prot.



C26A10H5T8. Fondi assegnati: 85.000 euro. Titolo: "PROTIC IONIC LIQUIDS: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques."

- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2011- prot. C26A11SMBW. Fondi assegnati: 80.000 euro. Titolo: "The structure of metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies."
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2012 – prot. C26A129ZAY. Fondi assegnati: 64.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in task specific ionic liquids: a combined experimental and theoretical investigation."
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2013 – prot. C26A13K8AN. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in complex liquids: a combined XAS and MD investigation."
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2014 – prot. C26A14L7CX. Fondi assegnati: 50.000 euro. Titolo: "The role of metal ions in the prion conversion of different human prion protein variants."
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2015 - prot. C26H159F5B. Fondi assegnati: 30000 euro. Titolo: "Hydrogen Peroxide Activation by Non-Heme Iron Complexes: A Route for Sustainable and Selective Oxidation Processes."
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2016 - Fondi assegnati: 36600 euro. Titolo: "Deep eutectic mixtures: a new generation of green solvents."

13) Incarichi

- 2011-2018: Rappresentante degli Assegnisti nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".
- 2009: Rappresentante dei Dottorandi di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".

14) Lettera di presentazione della Prof.ssa Paola D'Angelo del Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".

ELENCO PUBBLICAZIONI

CANDIDATO: CAMPETELLA Marco

- 1) M. Campetella, N. De Mitri, G. Prampolini, Automated parameterization of quantummechanically derived force-fields including explicit sigma holes: A pathway to energetic and structural features of halogen bonds in gas and condensed phase, *Journal of Chemical Physics*, vol. 53, pag. 044106, DOI: 10.1063/5.0014280 (2020).
- 2) M. Campetella, N. M. Nguyen, J. Baima, L. Maschio, F. Mauri, M. Calandra, Hybridfunctional electronic structure of multilayer graphene, *Physical Review B*, vol. 101, p. 165437, DOI: 10.1103/PhysRevB.101.165437 (2020).
- 3) M. Campetella, J. S. Garcia, Following the Evolution of Excited States along Photochemical Reaction Pathways, *The Journal of Computational Chemistry*, Vol. 41,



- p. 1156-1164, DOI: 10.1002/jcc.26162 (2020).
- 4) M. Campetella, F. Cappelluti, L. Gontrani, Medium Range Interactions Evidences in Compounds with Aliphatic Lateral Chain : 1-Pentanoic Acid, 1-Pentanol and Pentylammonium Nitrate as Test Cases, *Chemical Physics Letters*, vol. 734, p. 136738, DOI: 10.1016/j.cplett.2019.136738 (2019).
 - 5) J. S. Garcia, M Boggio-Pasqua, I. Ciofini, M. Campetella, Excited State Tracking During the Relaxation of Coordination Compounds. *The Journal of Computational Chemistry*, vol. 40, 1420–1428, DOI: 10.1002/jcc.25800 (2019).
 - 6) M. Campetella, A. Perfetto, I. Ciofini, Quantifying partial hole-particle distance at the excited state: A revised version of the DCT index, *Chemical Physics Letters*, vol. 714, p. 81-86, DOI: 10.1016/j.cplett.2018.10.060 (2019).
 - 7) M. Campetella, A. Mariani, C. Sadun, B. Wu, E.W. Castner Jr, L. Gontrani, Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 148, p. 134507, DOI: 10.1063/1.5021868 (2018).
 - 8) M. Campetella, A. Le Donne, M. Daniele, L. Gontrani, S. Lupi, E. Bodo, F. Leonelli, Hydrogen bonding features in cholinium-based protic ionic liquids from molecular dynamics simulations, *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 122, p. 2635-2645, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12455 (2018).
 - 9) M. Campetella, F. Maschietto, M.J. Frisch, G. Scalmani, I. Ciofini, C. Adamo, Charge transfer excitations in TDDFT: A ghost-hunter index, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 38, p. 2151-2156, DOI: 10.1002/jcc.24862 (2017).
 - 10) L. Gontrani, R. Caminiti, U. Salma, M. Campetella, A structural and theoretical study of the alkylammonium nitrates forefather: Liquid methylammonium nitrate, *Chemical Physics Letters*, vol. 684, p. 304-309, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.07.017 (2017).
 - 11) M. Campetella, M. Macchiagodena, L. Gontrani, B. Kirchner, Effect of alkyl chain length in protic ionic liquids: an AIMD perspective, *Molecular Physics*, vol. 115, p. 1582-1589, DOI: 10.1080/00268976.2017.1308027 (2017).
 - 12) M. Campetella, M. Montagna, L. Gontrani, E. Scarpellini, E. Bodo, Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 19, p. 11869-11880, DOI: 10.1039/C7CP01050H (2017).
 - 13) L. Gontrani, E. Scarpellini, R. Caminiti, M. Campetella, Bio ionic liquids and water mixtures: a structural study, *RSC Advances*, vol. 7, p.19338-19344, DOI: 10.1039/C6RA28545G (2017).
 - 14) M. Campetella, D. C. Martino, E. Scarpellini, L. Gontrani, Low-q peak in x-ray patterns of choline-phenylalanine and-homophenylalanine: A combined effect of chain and stacking, *Chemical Physics Letters*, vol. 660, p. 99-101, DOI: 10.1016/j.cplett.2016.08.015 (2016).
 - 15) M. Campetella, D. Bovi, R. Caminiti, L. Guidoni, L. Bencivenni, L. Gontrani, Structural and vibrational study of 2-methoxyethylammonium nitrate (2-omeean): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 145, p. 024507, DOI: 10.1063/1.4956459 (2016).
 - 16) M. Campetella, E. Bodo, M. Montagna, S. De Santis, L. Gontrani, Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. ab initio simulations of their condensed phases, *The Journal of Chemical Physics* vol. 144, p. 104504, DOI:



10.1063/1.4943197 (2016).

17) M. Campetella, E. Bodo, R. Caminiti, A. Martino, F. D'Apuzzo, S. Lupi, L. Gontrani, Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 142, p. 234502, DOI: 10.1063/1.4922442 (2015).

18) M. Campetella, S. De Santis, R. Caminiti, P. Ballirano, C. Sadun, L. Tanzi, L. Gontrani, Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?, *RSC Advances*, vol. 5, p. 50938-50941, DOI: 10.1039/C5RA07567J (2015).

19) S. De Santis, G. Masci, F. Casciotta, R. Caminiti, E. Scarpellini, M. Campetella, L. Gontrani, Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physicochemical characterization, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 17, p. 20687-20698, DOI: 10.1039/C5CP01612F (2015).

20) M. Campetella, L. Gontrani, F. Leonelli, L. Bencivenni, R. Caminiti, Two different models to predict ionic-liquid diffraction patterns: Fixed-charge versus polarizable potentials, *ChemPhysChem*, vol. 16, p. 197-203, DOI: 10.1002/cphc.201402577 (2015).

CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina

1) V. Migliorati, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 21, 13058-13069 (2019). journal IF: 3.43 citazioni: 2

2) V. Migliorati, A. Caruso, Paola D'Angelo.

Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy *INORGANIC CHEMISTRY*, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825 citazioni: 0

3) F. Sessa, V. Migliorati, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo.

On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻ based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567 citazioni: 11

4) V. Migliorati, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo.

Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study *INORGANIC CHEMISTRY* 56, 14013–14022 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 5

5) V. Migliorati, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo.

Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water *INORGANIC CHEMISTRY*, 56, 6214-6224 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 22

6) V. Migliorati, P. D'Angelo.

Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule *INORGANIC CHEMISTRY*, 55, 6703-6711 (2016). journal IF: 4.857 citazioni: 17

7) A. Serva, V. Migliorati, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo.

Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and



- experimental insight PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). journal IF: 4.123 citazioni: 24
- 8) F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati.
The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015). journal IF: 3.187 citazioni: 18
- 9) V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo.
Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015).journal IF: 4.449 citazioni: 29
- 10) V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo.
Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015).journal IF: 4.449 citazioni: 28
- 11) V. Migliorati, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). journal IF: 2.952 citazioni: 37
- 12) V. Migliorati, P. D'Angelo.
A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg 2+ ion solvation properties in methanol solution RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). journal IF: 3.708 citazioni: 16
- 13) V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti.
A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 28
- 14) V. Migliorati, A. Zitolo, P. D'Angelo.
Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 45
- 15) P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati.
Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013).journal IF: 3.377 citazioni: 40
- 16) V. Migliorati, M. Mancini, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, P. D'Angelo. Hydration properties of the Zn 2+ ion in water at high pressure INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1141-1150 (2013). journal IF: 4.794 citazioni: 31
- 17) V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, R. Caminiti.
Crystal polymorphism of hexylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 116, 2104-2113 (2012). journal IF: 3.607 citazioni: 24
- 18) V. Migliorati, A. Zitolo, G. Chillemi, P. D'Angelo.
Influence of the second coordination shell on the XANES spectra of Zn(II) ion in water and methanol CHEMPLUSCHEM, 77, 234-239 (2012). journal IF: 3.242 (è riferito all'anno 2013 poiché l'IF relativo al 2012 non è disponibile). citazioni: 30



19) V. Migliorati, G. Chillemi, P. D'Angelo.

On the Solvation of the Zn 2+ Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach INORGANIC CHEMISTRY, 50, 8509-8515 (2011). journal IF: 4.601 citazioni: 28

20) V. Migliorati, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo. Effect of the Zn 2+ and Hg 2+ Ions on the Structure of Liquid Water JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 115, 4798-4803 (2011). journal IF: 2.946 citazioni: 32

La Commissione elenca, per ogni candidato, i titoli e le pubblicazioni valutabili come riportato nell'Allegato 2/A.

La Commissione inizia la valutazione dei titoli, delle pubblicazioni e delle tesi di dottorato dei candidati.

Si procede seguendo l'ordine alfabetico dei candidati.

Il Presidente ricorda che le pubblicazioni redatte in collaborazione possono essere valutate sulla base dei criteri individuati nella prima riunione.

Candidato CAMPETELLA Marco

Da parte di ciascun commissario, si procede all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi commissari.

Ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale.

I giudizi dei singoli Commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (All. 2/B).

Candidata MIGLIORATI Valentina

Da parte di ciascun commissario, si procede all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi commissari.

Ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale.

I giudizi dei singoli Commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (All. 2/B).

La Commissione, dopo aver effettuato una discussione collegiale sul profilo e sulla produzione scientifica dei candidati, ammette alla fase successiva della procedura i seguenti candidati:

1. CAMPETELLA Marco
2. MIGLIORATI Valentina

Il Presidente invita il Responsabile del procedimento a comunicare ai suddetti candidati la data di convocazione per lo svolgimento del colloquio in forma seminariale previsto dal bando.

La Commissione viene sciolta alle ore 18,30.

Letto, approvato e sottoscritto.



Firma del Commissari

Prof. Franco Mazzei

Prof.ssa Concetta Giancola

Prof. Gianfranco Bocchinfuso



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 CONCORSUALE 03/A2 - 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. 15/2020 DEL 09 OTTOBRE 2020

L'anno 2021, il giorno 09 del mese di Febbraio alle ore 09,30 si è riunita per via telematica (Google Meet), 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. 67/2020 Prot. 2279 del 18/12/2020 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 Concetta Giancola – professore ordinario presso il Dipartimento di Farmacia, Università di Napoli Federico II (Componente)
- Prof. Gianfranco Bocchinfuso - 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 09,30

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

CANDIDATO: CAMPETELLA Marco

VERIFICA TITOLI VALUTABILI:

- 1) Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze dei Materiali conseguito il 10/2014 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". "Structural studies of ionic liquids by means of X-ray and theoretical methods". VALUTABILE
- 2) Titoli di studio:
 - Laurea Triennale in Chimica conseguita 9/2004 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". NON VALUTATA
 - Laurea Magistrale in Chimica conseguita 9/2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE
 - Laurea triennale in Fisica conseguita 9/2009 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". NON VALUTATA
 - Laurea Magistrale in Fisica conseguita 9/2011 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE
- 3) Dal 07/2015 ad oggi titolare dei seguenti assegni di ricerca o posizione



equivalente:

- Presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Pisa. Responsabile scientifico: Prof.ssa Benedetta Minnucci. Progetti di ricerca: "Simulations of Excitonic Absorption and Circular Dichroism Spectra of Proteins and Light harvesting systems" – Characterization of a robust and automated protocol for the derivation of sound force field parameters, suitable for condensed-phase classical simulations. (07/2015-07/2016). VALUTABILE
 - Presso il Centre national de la recherche scientifique (CNRS) di Parigi. Responsabile scientifico: Dr. Ilaria Ciofini. Progetto di ricerca: Study on the behaviour of the particle-hole distance varying both the acceptor donor distance (in push-pull systems) and the functionals in TDDFT calculations. (09/2016-08/2018) VALUTABILE
 - Presso il Centre national de la recherche scientifique (CNRS) di Parigi. Responsabile scientifico: Dr Matteo Calandra. Progetto di ricerca: Characterization of electronic and structural properties of different kinds of 2D materials. (09/2018-08/2020) VALUTABILE
 - Presso il Centre national de la recherche scientifique (CNRS) di Parigi. Responsabile scientifico: Dr Paolo Barone. Progetto di ricerca: characterization of electronic and structural properties of different kinds of 1D materials. (09/2020-) VALUTABILE
- 4) Partecipazione a corsi di perfezionamento post-lauream:
- May 2012 CECAM Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) tutorial: understanding condensed matter and molecular physics (Lausanne, Switzerland) VALUTABILE
 - June 2012 School in Introduction to HPC: high performance computing, CASPUR (Rome, Italy) VALUTABILE
 - February 2013 School in Introduction to HPC: parallel computing, CASPUR (Rome, Italy)
 - August 2015 CECAM 4 th CP2K Tutorial (Lausanne, Switzerland) VALUTABILE
 - September 2017 European Summer School in Quantum Chemistry (Torre Normanna, Italy) VALUTABILE
 - January 2020 Computational School on Electronic Excitations in Novel Materials Using the Yambo Code (Trieste, Italy) VALUTABILE
- 5) Partecipazione a congressi e workshop
- «ACS» (Boston, U.S.A.). Presentazione orale dal titolo: "Tuned quantification of particle-hole distance in charge-transfer excitations: A revised version of the DCT index" (04/2018). VALUTABILE
 - «TheoBio» (San Sebastian, Spain). Presentazione orale: "Charge Transfer Excitations in TDDFT: A Ghost-Hunter Index" (03/2017). VALUTABILE
 - «CMS» (Warwick, U.K.). Presentazione orale: "Ghost states in TDDFT : a reliable descriptor for their detection" (03/2017). VALUTABILE
 - «ESCS» (Paris, France). Presentazione orale: "Excitonic Approach in Complex Light Harvesting Systems" (11/2016). VALUTABILE
 - «ACS» (San Diego, U.S.A.). Presentazione orale: "Simulation of the electronic spectra of LH2 complex of bacteria through a polarizable QM/MM



approach" (04/2016). VALUTABILE

- «Winter Modeling» (Modena, Italy). Presentazione di un Poster: "Static and Dynamical Properties of Oxirane : an Experimental and Theoretical Approach" (03/2013). VALUTABILE

6) Attività didattica

- 2018: Insegnamento di un Mini-corso per gli studenti di dottorato: "Principi di Meccanica Quantistica", presso ENSCP Chimie ParisTech. VALUTABILE
- a.a. 2013-2014: Assistenza per i corsi di Chimica e Fisica per la laurea triennale in Scienze Naturali, Università di Roma "La Sapienza". VALUTABILE
- Assistenza nella realizzazione di una tesi Magistrale in Chimica (2015) e di una tesi di Dottorato in Scienze Chimiche (2019) VALUTABILE

7) Attività di Peer Review

Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche internazionali: the Journal of Chemical Theory and Computation, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Physical Chemistry Chemical Physics, Computational and Theoretical Chemistry, The European Physical Journal Plus, International Journal of Quantum Chemistry, Molecular Physics. VALUTABILE

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI:

Lavoro 1: M. Campetella, N. De Mitri, G. Prampolini, Automated parameterization of quantummechanically derived force-fields including explicit sigma holes: A pathway to energetic and structural features of halogen bonds in gas and condensed phase, Journal of Chemical Physics, vol. 53, pag. 044106, DOI: 10.1063/5.0014280 (2020). VALUTABILE

Lavoro 2: M. Campetella, N. M. Nguyen, J. Baima, L. Maschio, F. Mauri, M. Calandra, Hybridfunctional electronic structure of multilayer graphene, Physical Review B, vol. 101, p. 165437, DOI: 10.1103/PhysRevB.101.165437 (2020). VALUTABILE

Lavoro 3: M. Campetella, J. S. Garcia, Following the Evolution of Excited States along Photochemical Reaction Pathways, The Journal of Computational Chemistry, Vol. 41, p. 1156-1164, DOI: 10.1002/jcc.26162 (2020). VALUTABILE

Lavoro 4: M. Campetella, F. Cappelluti, L. Gontrani, Medium Range Interactions Evidences in Compounds with Aliphatic Lateral Chain : 1-Pentanoic Acid, 1-Pentanol and Pentylammonium Nitrate as Test Cases, Chemical Physics Letters, vol. 734, p. 136738, DOI: 10.1016/j.cplett.2019.136738 (2019). VALUTABILE

Lavoro 5: J. S. Garcia, M Boggio-Pasqua, I. Ciofini, M. Campetella, Excited State Tracking During the Relaxation of Coordination Compounds. The Journal of Computational Chemistry, vol. 40, 1420–1428, DOI: 10.1002/jcc.25800 (2019). VALUTABILE

Lavoro 6: M. Campetella, A. Perfetto, I. Ciofini, Quantifying partial hole-particle distance at the excited state: A revised version of the DCT index, Chemical Physics Letters, vol. 714, p. 81-86, DOI: 10.1016/j.cplett.2018.10.060 (2019). VALUTABILE



Lavoro 7: M. Campetella, A. Mariani, C. Sadun, B. Wu, E.W. Castner Jr, L. Gontrani, Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 148, p. 134507, DOI: 10.1063/1.5021868 (2018). VALUTABILE

Lavoro 8: M. Campetella, A. Le Donne, M. Daniele, L. Gontrani, S. Lupi, E. Bodo, F. Leonelli, Hydrogen bonding features in cholinium-based protic ionic liquids from molecular dynamics simulations, *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 122, p. 2635-2645, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12455 (2018). VALUTABILE

Lavoro 9: M. Campetella, F. Maschietto, M.J. Frisch, G. Scalmani, I. Ciofini, C. Adamo, Charge transfer excitations in TDDFT: A ghost-hunter index, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 38, p. 2151-2156, DOI: 10.1002/jcc.24862 (2017). VALUTABILE

Lavoro 10: L. Gontrani, R. Caminiti, U. Salma, M. Campetella, A structural and theoretical study of the alkylammonium nitrates forefather: Liquid methylammonium nitrate, *Chemical Physics Letters*, vol. 684, p. 304-309, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.07.017 (2017).

Lavoro 11: M. Campetella, M. Macchiagodena, L. Gontrani, B. Kirchner, Effect of alkyl chain length in protic ionic liquids: an AIMD perspective, *Molecular Physics*, vol. 115, p. 1582-1589, DOI: 10.1080/00268976.2017.1308027 (2017). VALUTABILE

Lavoro 12: M. Campetella, M. Montagna, L. Gontrani, E. Scarpellini, E. Bodo, Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 19, p. 11869-11880, DOI: 10.1039/C7CP01050H (2017). VALUTABILE

Lavoro 13: L. Gontrani, E. Scarpellini, R. Caminiti, M. Campetella, Bio ionic liquids and water mixtures: a structural study, *RSC Advances*, vol. 7, p.19338-19344, DOI: 10.1039/C6RA28545G (2017). VALUTABILE

Lavoro 14: M. Campetella, D. C. Martino, E. Scarpellini, L. Gontrani, Low-q peak in x-ray patterns of choline-phenylalanine and-homophenylalanine: A combined effect of chain and stacking, *Chemical Physics Letters*, vol. 660, p. 99-101, DOI: 10.1016/j.cplett.2016.08.015 (2016). VALUTABILE

Lavoro 15: M. Campetella, D. Bovi, R. Caminiti, L. Guidoni, L. Bencivenni, L. Gontrani, Structural and vibrational study of 2-methoxyethylammonium nitrate (2-omeean): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 145, p. 024507, DOI: 10.1063/1.4956459 (2016). VALUTABILE

Lavoro 16: M. Campetella, E. Bodo, M. Montagna, S. De Santis, L. Gontrani, Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. ab initio simulations of their condensed phases, *The Journal of Chemical Physics* vol. 144, p. 104504, DOI: 10.1063/1.4943197 (2016). VALUTABILE

Lavoro 17: M. Campetella, E. Bodo, R. Caminiti, A. Martino, F. D'Apuzzo, S. Lupi, L. Gontrani, Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 142, p. 234502, DOI: 10.1063/1.4922442 (2015). VALUTABILE

Lavoro 18: M. Campetella, S. De Santis, R. Caminiti, P. Ballirano, C. Sadun, L. Tanzi, L. Gontrani, Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids



without an aliphatic chain?, RSC Advances, vol. 5, p. 50938-50941, DOI: 10.1039/C5RA07567J (2015). VALUTABILE

Lavoro 19: S. De Santis, G. Masci, F. Casciotta, R. Caminiti, E. Scarpellini, M. Campetella, L. Gontrani, Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physicochemical characterization, Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 17, p. 20687-20698, DOI: 10.1039/C5CP01612F (2015). VALUTABILE

Lavoro 20: M. Campetella, L. Gontrani, F. Leonelli, L. Bencivenni, R. Caminiti, Two different models to predict ionic-liquid diffraction patterns: Fixed-charge versus polarizable potentials, ChemPhysChem, vol. 16, p. 197-203, DOI: 10.1002/cphc.201402577 (2015). VALUTABILE

TESI DI DOTTORATO

La tesi di dottorato non è stata allegata. NON E' VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato è coautore di 38 pubblicazioni su riviste internazionali, di cui 23 come primo, ultimo nome e/o corresponding author. Dichiara 6 tra contributi orali (5) e 1 poster a convegni nazionali ed internazionali. Il candidato riporta (sorgente Scopus) un numero totale citazioni 521, Numero medio di citazioni per pubblicazione 13,7; H-index 15. L'Impact Factor totale, calcolato dalla Commissione: 122,36 (Journal of Citation Report).

CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

1) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Fisica (settore concorsuale 03/A2 - Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche). Data conseguimento abilitazione: 03/08/2017. Si allega alla presente domanda il giudizio della commissione nazionale. VALUTABILE

2) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici). Data conseguimento abilitazione: 01/12/2014. Si allega alla presente domanda il giudizio della commissione nazionale. VALUTABILE

3) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici). Data conseguimento abilitazione: 07/08/2018. Si allega alla presente domanda il giudizio della commissione nazionale. VALUTABILE

4) Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Fondamenti Chimici delle Tecnologie (settore concorsuale 03/B2). Data conseguimento abilitazione: 25/10/2018. VALUTABILE

5) Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito il 17/12/2009 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Titolo della tesi: A combined



theoretical and experimental investigation of Ion Hydration. Si allega la tesi di dottorato. VALUTABILE

6) Laurea in Chimica conseguita il 21/9/2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (voto 110/110 e lode). VALUTABILE

7) Dal 1/3/2010 – 28/2/2018: titolare dei seguenti Assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Responsabile scientifico: Prof.ssa Paola D'Angelo.

- Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati" (01/03/2010-28/02/2015). VALUTABILE
- Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi" (01/03/2015-28/02/2018). VALUTABILE
- Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi statistici e chemiometrici per l'ottimizzazione di biomarcatori di latte vaccino e bufalino" (01/03/2018-31/08/2019 (Nei periodi 27/6/2018-26/7/2018 e 8/1/2019-8/6/2019 il contratto è stato sospeso rispettivamente per gravidanza a rischio e maternità). VALUTABILE
- Progetto di ricerca: "Una nuova classe di solventi verdi: i solventi eutettici profondi" (01/12/2019-attualmente in corso). VALUTABILE

8) Partecipazione a corsi di perfezionamento post-lauream:

- Partecipazione al corso: "Understanding Molecular Simulations". 7-18 Gennaio 2008. Università di Amsterdam. Amsterdam. VALUTABILE
- Partecipazione al corso: "Ottimizzazione di codici scientifico-tecnici." 17-19 Marzo 2009. CASPUR. Roma. VALUTABILE
- Partecipazione al corso: "Introduzione all'HPC: calcolo parallelo". 12-14 Maggio 2009. CASPUR. Roma. VALUTABILE
- Partecipazione al corso: "Scripting in Python". 25-28 Ottobre 2011. CASPUR. Roma. VALUTABILE

9) Partecipazione a congressi e workshops

- "Terzo Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Zn 2+ ion hydration under pressure". 18-19 Giugno 2008. Università "La Sapienza". Roma. VALUTABILE
- "XXXIII 5-10 Luglio 2009. Sorrento. Congresso Nazionale della società Chimica Italiana". NON VALUTABILE
- "14th International Conference on X-ray Absorption Fine structure (XAFS14)". Presentazione di un contributo orale dal titolo "Ion Hydration in high-density water". 26-31 Luglio 2009. Camerino. VALUTABILE
- "CECAM workshop on Aqueous Solvation of Ions". Presentazione di un contributo orale dal titolo "A combined theoretical and experimental investigation of ion hydration". 22-24 Febbraio 2010. CECAM-ETHZ, Zurigo, Svizzera. VALUTABILE
- "International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2" Presentazione di un poster dal titolo: "A combined Molecular Dynamics and X-ray diffraction study of protic ionic liquid/water mixtures" 09-11 Giugno 2010. Roma. VALUTABILE
- "Quarto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo:



“Studio strutturale e dinamico della coordinazione in acqua dello ione Br⁻”. 16-17 Giugno 2010. Università “La Sapienza”. Roma. VALUTABILE

- “Quinto Convegno Giovani Chimici”. Presentazione di un poster dal titolo: “Effetto degli ioni Zn(2+) e Hg(2+) sulla struttura dell'acqua”. 12-13 Giugno 2012. Università “La Sapienza”. Roma. VALUTABILE
- “Sesto Convegno Giovani Chimici”. Presentazione di un poster dal titolo: “Le funzioni di Wannier: uno sguardo su strutture e dinamiche nascoste”. 17-18 Giugno 2014. Università “La Sapienza”. Roma. VALUTABILE
- Workshop: “Computer Simulations for Condensed Phase Systems: From Correlated Electrons to Novel Materials” 4-6 Maggio 2015. CNR. Roma. NON VALUTABILE
- Invited Speaker alla Conferenza internazionale “the EMN Bangkok Meeting on Materials 2015”. Presentazione di una comunicazione orale su invito dal titolo: “Local Order and Long Range Correlations in Imidazolium Halide Ionic Liquids”. 10-13 Novembre 2015, Bangkok, Thailandia. VALUTABILE
- “III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana”. Presentazione di una comunicazione orale dal titolo: “The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs”. 14-16 Dicembre 2015, Sede Centrale del CNR, Roma. VALUTABILE
- “XXIV SILS (Società italiana luce di Sinctrotrone) meeting 2016” Presentazione di un poster dal titolo: “Unraveling the coordination geometry of Sc 3+ in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule”. 21-23 Settembre 2016. Università di Bari. Bari. VALUTABILE
- “IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana”. Presentazione di un poster dal titolo: “Sc 3+ in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule”. 3-5 Ottobre 2016. Scuola Normale Superiore. Pisa. VALUTABILE
- “XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana”. Presentazione di un contributo orale dal titolo: “Unraveling the solvation properties of Lanthanide (3+) ions: a combined Molecular Dynamics and XAS approach”. 1-4 Luglio 2019. Università “La Sapienza”. Roma. VALUTABILE

10) Attività didattica

- a.a. 2020/2021 (attualmente in corso)
- Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE
- a.a. 2019/2020
- Corso di dottorato "Metodi computazionali per lo studio di sistemi molecolari complessi" per gli studenti del corso di dottorato in Scienze Chimiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE
- 2012-2018: Assistenza nella supervisione di tesi di Laurea magistrale e



triennale in chimica e nella supervisione di dottorandi di ricerca (in particolare di due dottorandi di ricerca, 5 lauree magistrali e 8 lauree triennali). VALUTABILE

- a.a. 2007/2008, 2008/2009, 2009/2010, 2010/2011, 2011/2012, 2012/2013, 2013/2014, 2014/2015, 2015/2016, 2017/2018: Lezioni di Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica – argomento del corso: Meccanica Quantistica) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE
- a.a. 2006/2007: Contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico integrative, propedeutiche e di recupero presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE

11) Attività di Peer Review

Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche internazionali dell'American Chemical Society, dell'American Institute of Physics, e della Royal Society of Chemistry, tra le quali: Inorganic Chemistry, the Journal of Physical Chemistry, the Journal of Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Molecular Liquids, Catalysis Science & Technology, Nanoscale e Journal of Chemical Information and Modeling. VALUTABILE

12) Partecipazione scientifica a progetti di ricerca

- Responsabile scientifico del progetto per avvio alla ricerca Università La Sapienza 2015prot. C26N159PNB. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "Unraveling halide hydration: the interplay of Car-Parrinello Molecular Dynamics and EXAFS spectroscopy." VALUTABILE
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA. Anno: 2013-2014 - grant HP10CCQEUQ . Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in Ionic Liquids." 1070000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2015 - grant HP10C2Q0F3. Titolo: "Structure and properties of geminal dicationic Ionic Liquids/water mixtures." 1100000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2017 - grant HP10CZTDIS. Titolo: "Unraveling the peculiar properties of a new generation of green solvents: the deep eutectic solvents" 2100000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE
- Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2018-2019 - grant HP10CGVY3L. Titolo: "Deep eutectic solvents: a combined theoretical and experimental study of the structural and dynamic properties" 400000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2010 - prot. C26A10H5T8. Fondi assegnati: 85.000 euro. Titolo: "PROTIC IONIC LIQUIDS: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques." VALUTABILE
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2011- prot. C26A11SMBW. Fondi assegnati: 80.000 euro. Titolo: "The structure of



metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies." VALUTABILE

- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2012 – prot. C26A129ZAY. Fondi assegnati: 64.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in task specific ionic liquids: a combined experimental and theoretical investigation." VALUTABILE
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2013 – prot. C26A13K8AN. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in complex liquids: a combined XAS and MD investigation." VALUTABILE
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2014 – prot. C26A14L7CX. Fondi assegnati: 50.000 euro. Titolo: "The role of metal ions in the prion conversion of different human prion protein variants." VALUTABILE
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2015 - prot. C26H159F5B. Fondi assegnati: 30000 euro. Titolo: "Hydrogen Peroxide Activation by Non-Heme Iron Complexes: A Route for Sustainable and Selective Oxidation Processes." VALUTABILE
- Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2016 - Fondi assegnati: 36600 euro. Titolo: "Deep eutectic mixtures: a new generation of green solvents." VALUTABILE

13) Incarichi

- 2011-2018: Rappresentante degli Assegnisti nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". NON VALUTABILE
- 2009: Rappresentante dei Dottorandi di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". NON VALUTABILE

14) Lettera di presentazione della Prof.ssa Paola D'Angelo del Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". NON VALUTATA

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI:

Lavoro 1: V. Migliorati, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019). journal IF: 3.43 citazioni: 2 VALUTABILE

Lavoro 2: V. Migliorati, A. Caruso, Paola D'Angelo.

Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825 citazioni: 0 VALUTABILE

Lavoro 3: F. Sessa, V. Migliorati, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo.

On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻ based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL



CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567
citazioni: 11 VALUTABILE

Lavoro 4: V. Migliorati, A. Filippini, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo.
Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the
Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study
INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 5
VALUTABILE

Lavoro 5: V. Migliorati, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo.
Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in
Water INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). journal IF: 4.700
citazioni: 22 VALUTABILE

Lavoro 6: V. Migliorati, P. D'Angelo.
Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-
Coordinated Water Molecule INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016).
journal IF: 4.857 citazioni: 17 VALUTABILE

Lavoro 7: A. Serva, V. Migliorati, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo.
Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical
and experimental insight PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18,
16544-16554 (2016). journal IF: 4.123 citazioni: 24 VALUTABILE

Lavoro 8: F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati.
The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of
Lone Pairs JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015).
journal IF: 3.187 citazioni: 18 VALUTABILE

Lavoro 9: V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo.
Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a
combined molecular dynamics and XAS study PHYSICAL CHEMISTRY
CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015).journal IF: 4.449 citazioni: 29
VALUTABILE

Lavoro 10: V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon,
P. D'Angelo.
Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to
understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic
liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474
(2015).journal IF: 4.449 citazioni: 28 VALUTABILE

Lavoro 11: V. Migliorati, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide
hydration: A high dilution approach JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141,
044509 (2014). journal IF: 2.952 citazioni: 37 VALUTABILE

Lavoro 12: V. Migliorati, P. D'Angelo.
A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg
2+ ion solvation properties in methanol solution RSC ADVANCES, 3, 21118-21126
(2013). journal IF: 3.708 citazioni: 16 VALUTABILE

Lavoro 13: V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R.
Caminiti.

A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium
chlorides and of their aqueous solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY
B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 28 VALUTABILE

Lavoro 14: V. Migliorati, A. Zitolo, P. D'Angelo.



Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 45 VALUTABILE

Lavoro 15: P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati.

Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 40 VALUTABILE

Lavoro 16: V. Migliorati, M. Mancini, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, P. D'Angelo. Hydration properties of the Zn 2+ ion in water at high pressure INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1141-1150 (2013). journal IF: 4.794 citazioni: 31 VALUTABILE

Lavoro 17: V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, R. Caminiti.

Crystal polymorphism of hexylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 116, 2104-2113 (2012). journal IF: 3.607 citazioni: 24 VALUTABILE

Lavoro 18: V. Migliorati, A. Zitolo, G. Chillemi, P. D'Angelo.

Influence of the second coordination shell on the XANES spectra of Zn(II) ion in water and methanol CHEMPLUSCHEM, 77, 234-239 (2012). journal IF: 3.242 (è riferito all'anno 2013 poiché l'IF relativo al 2012 non è disponibile). citazioni: 30 VALUTABILE

Lavoro 19: V. Migliorati, G. Chillemi, P. D'Angelo.

On the Solvation of the Zn 2+ Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach INORGANIC CHEMISTRY, 50, 8509-8515 (2011). journal IF: 4.601 citazioni: 28 VALUTABILE

Lavoro 20: V. Migliorati, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo. Effect of the Zn 2+ and Hg 2+ Ions on the Structure of Liquid Water JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 115, 4798-4803 (2011). journal IF: 2.946 citazioni: 32 VALUTABILE

TESI DI DOTTORATO

La tesi di dottorato è stata allegata. È VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata dichiara una produzione scientifica di 52 lavori su riviste internazionali, di cui 18 come primo o ultimo nome. La candidata è presente come primo nome e ultimo nome in 28 su 52 lavori pubblicati. È corresponding author in 26 pubblicazioni. Dichiara 12 tra contributi orali (5, di cui uno con invito) e poster (7) a convegni nazionali ed internazionali.

Il numero di citazioni totali è 1281 e quello medio: 24,6, l'Impact Factor totale è 186,68 (Journal of Citation Report), mentre quello medio per pubblicazione è 3,81, l'H-index è 24.

La Commissione viene sciolta alle ore 18,30.



Letto, approvato e sottoscritto.

Firma del Commissari

Prof. Franco Mazzei

Prof.ssa Concetta Giancola

Prof. Gianfranco Bocchinfuso



ALLEGATO 2/B
GIUDIZI INDIVIDUALI E COLLEGIALI

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" BANDITA CON D.D. N. 15/2020 DEL 09 OTTOBRE 2020

L'anno 2021, il giorno 9 del mese di Febbraio alle ore 9,30 si è riunita per via telematica (Google Meet), 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. 67/2020 Prot. 2279 del 18/12/2020 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 Concetta Giancola – professore ordinario presso il Dipartimento di Farmacia, Università di Napoli Federico II (Componente)
- Prof. Gianfranco Bocchini - 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 9,30 e procede ad elaborare la valutazione individuale e collegiale dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati.

CANDIDATO: CAMPETELLA Marco

COMMISSARIO 1 – Prof. Franco Mazzei

TITOLI

Il candidato CAMPETELLA Marco ha conseguito la Laurea Magistrale in Chimica nel Settembre del 2006 e quella in Fisica Settembre del 2011 presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza". Nell'Ottobre del 2014 ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze dei Materiali nel medesimo ateneo, con una tesi dal titolo: "Structural studies of ionic liquids by means of X-ray and theoretical methods". Nel periodo 2015 ad oggi è risultato titolare di una serie di posizioni Postdoc presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Pisa e in diversi laboratori del CNR di Parigi, in linee di ricerca riconducibili al SSD CHIM/02. Ha partecipato ad una serie di corsi di perfezionamento post-lauream. Ha svolto attività di assistenza nella realizzazione di una tesi di Laurea magistrale in Chimica (2015) e di una tesi di dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (2019). Inoltre, nel 2018 ha tenuto un minicorso sui principi della meccanica quantistica per gli studenti di dottorato presso ENSCP Chimie ParisTech. Dall'analisi dei titoli prodotti dal candidato si può mettere



in evidenza un profilo curriculare di buon livello riguardo all'attività di ricerca svolta, anche per quanto riguarda la continuità temporale, mentre è discreto dal punto di vista dell'attività didattica.

Il giudizio complessivo sui titoli è BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Lavoro 1: M. Campetella, N. De Mitri, G. Prampolini, Automated parameterization of quantummechanically derived force-fields including explicit sigma holes: A pathway to energetic and structural features of halogen bonds in gas and condensed phase, *Journal of Chemical Physics*, vol. 53, pag. 044106, DOI: 10.1063/5.0014280 (2020).

Giudizio:

La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un buon contributo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori.

Lavoro 2: M. Campetella, N. M. Nguyen, J. Baima, L. Maschio, F. Mauri, M. Calandra, Hybridfunctional electronic structure of multilayer graphene, *Physical Review B*, vol. 101, p. 165437, DOI: 10.1103/PhysRevB.101.165437 (2020).

Giudizio

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è più che buona tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un contributo significativo, come si evince dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 3: M. Campetella, J. S. Garcia, Following the Evolution of Excited States along Photochemical Reaction Pathways, *The Journal of Computational Chemistry*, Vol. 41, p. 1156-1164, DOI: 10.1002/jcc.26162 (2020).

Giudizio:

Il lavoro affronta una tematica coerente con il settore disciplinare. E' buona la collocazione della rivista, in base all'I.F. e al suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il contributo del candidato può essere considerato significativo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 4: M. Campetella, F. Cappelluti, L. Gontrani, Medium Range Interactions Evidences in Compounds with Aliphatic Lateral Chain: 1-Pentanoic Acid, 1-Pentanol and Pentylammonium Nitrate as Test Cases, *Chemical Physics Letters*, vol. 734, p. 136738, DOI: 10.1016/j.cplett.2019.136738 (2019).

Giudizio:

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare CHIM/02. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un contributo significativo, in base alla prima posizione



nell'elenco degli autori e alla sua indicazione come corresponding author.

Lavoro 5: J. S. Garcia, M Boggio-Pasqua, I. Ciofini, M. Campetella, Excited State Tracking During the Relaxation of Coordination Compounds. *The Journal of Computational Chemistry*, vol. 40, 1420–1428, DOI: 10.1002/jcc.25800 (2019).

Giudizio

L'argomento tratto risulta coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, considerando l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il contributo del candidato può considerarsi significativo, in accordo con la sua presenza nell'ultima posizione dell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 6: M. Campetella, A. Perfetto, I. Ciofini, Quantifying partial hole-particle distance at the excited state: A revised version of the DCT index, *Chemical Physics Letters*, vol. 714, p. 81-86, DOI: 10.1016/j.cplett.2018.10.060 (2019).

Giudizio:

Il lavoro prende in considerazione un argomento coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un contributo significativo, in base alla prima posizione nell'elenco degli autori e alla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 7: M. Campetella, A. Mariani, C. Sadun, B. Wu, E.W. Castner Jr, L. Gontrani, Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 148, p. 134507, DOI: 10.1063/1.5021868 (2018).

Giudizio:

La ricerca sviluppata in questa pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La rivista si può considerare di buon livello, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha svolto un ruolo significativo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 8: M. Campetella, A. Le Donne, M. Daniele, L. Gontrani, S. Lupi, E. Bodo, F. Leonelli, Hydrogen bonding features in cholinium-based protic ionic liquids from molecular dynamics simulations, *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 122, p. 2635-2645, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12455 (2018).

Giudizio:

L'argomento trattato in questo lavoro è coerente con il settore disciplinare oggetto della procedura di valutazione. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto sia dell'I.F. che del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Si può considerare buono il contributo del candidato in accordo con la presenza come primo nome nell'elenco degli autori.

Lavoro 9: M. Campetella, F. Maschietto, M.J. Frisch, G. Scalmani, I. Ciofini, C.



Adamo, Charge transfer excitations in TDDFT: A ghost-hunter index, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 38, p. 2151-2156, DOI: 10.1002/jcc.24862 (2017).

Giudizio:

Da un'attenta analisi si può osservare che la pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è più che buona, in base all'I.F. e al suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un contributo buono, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori.

Lavoro 10: L. Gontrani, R. Caminiti, U. Salma, M. Campetella, A structural and theoretical study of the alkylammonium nitrates forefather: Liquid methylammonium nitrate, *Chemical Physics Letters*, vol. 684, p. 304-309, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.07.017 (2017).

Giudizio:

Si può affermare che la tematica affrontata in questa pubblicazione sia coerente con il settore disciplinare. Il livello della rivista è discreto, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Possiamo considerare un contributo significativo da parte del candidato, come dimostrato dall'ultima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 11: M. Campetella, M. Macchiagodena, L. Gontrani, B. Kirchner, Effect of alkyl chain length in protic ionic liquids: an AIMD perspective, *Molecular Physics*, vol. 115, p. 1582-1589, DOI: 10.1080/00268976.2017.1308027 (2017).

Giudizio:

La tematica sviluppata in questa ricerca è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un contributo significativo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come corresponding author.

Lavoro 12: M. Campetella, M. Montagna, L. Gontrani, E. Scarpellini, E. Bodo, Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 19, p. 11869-11880, DOI: 10.1039/C7CP01050H (2017).

Giudizio:

Si può notare una coerenza dell'argomento trattato in questo lavoro, con il settore disciplinare. La rivista è di ottimo livello, considerando l'I.F. e la suddivisione in quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha dato un buon contributo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori.

Lavoro 13: L. Gontrani, E. Scarpellini, R. Caminiti, M. Campetella, Bio ionic liquids and water mixtures: a structural study, *RSC Advances*, vol. 7, p.19338-19344, DOI: 10.1039/C6RA28545G (2017).

Giudizio:

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è più che buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili



del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un contributo significativo, come dimostrato dall'ultima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 14: M. Campetella, D. C. Martino, E. Scarpellini, L. Gontrani, Low-q peak in x-ray patterns of choline-phenylalanine and-homophenylalanine: A combined effect of chain and stacking, *Chemical Physics Letters*, vol. 660, p. 99-101, DOI: 10.1016/j.cplett.2016.08.015 (2016).

Giudizio:

La tematica affrontata è congrua con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un buon contributo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori.

Lavoro 15: M. Campetella, D. Bovi, R. Caminiti, L. Guidoni, L. Bencivenni, L. Gontrani, Structural and vibrational study of 2-methoxyethylammonium nitrate (2-omeean): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 145, p. 024507, DOI: 10.1063/1.4956459 (2016).

Giudizio:

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare. Il livello della rivista è buono, considerando l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science Il candidato ha fornito un contributo buono, come si evince dalla collocazione in prima posizione nell'elenco degli autori.

Lavoro 16: M. Campetella, E. Bodo, M. Montagna, S. De Santis, L. Gontrani, Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. ab initio simulations of their condensed phases, *The Journal of Chemical Physics* vol. 144, p. 104504, DOI: 10.1063/1.4943197 (2016).

Giudizio:

Si nota una coerenza della ricerca affrontata in questa pubblicazione con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science Il candidato ha fornito un contributo buono, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori.

Lavoro 17: M. Campetella, E. Bodo, R. Caminiti, A. Martino, F. D'Apuzzo, S. Lupi, L. Gontrani, Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 142, p. 234502, DOI: 10.1063/1.4922442 (2015).

Giudizio:

L'argomento di questo lavoro è coerente con il settore disciplinare. La rivista è di buon livello, in base all'I.F. e alla suddivisione in quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un buon contributo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori.

Lavoro 18: M. Campetella, S. De Santis, R. Caminiti, P. Ballirano, C. Sadun, L.



Tanzi, L. Gontrani, Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?, RSC Advances, vol. 5, p. 50938-50941, DOI: 10.1039/C5RA07567J (2015).

Giudizio:

L'argomento della ricerca è coerente con il settore disciplinare. La rivista è più che buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il contributo del candidato può essere considerato buono, in base alla sua presenza come primo nome nell'elenco degli autori.

Lavoro 19: S. De Santis, G. Masci, F. Casciotta, R. Caminiti, E. Scarpellini, M. Campetella, L. Gontrani, Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physicochemical characterization, Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 17, p. 20687-20698, DOI: 10.1039/C5CP01612F (2015).

Giudizio:

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare. La rivista è di ottimo livello, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Si può considerare discreto il contributo fornito dal candidato.

Lavoro 20: M. Campetella, L. Gontrani, F. Leonelli, L. Bencivenni, R. Caminiti, Two different models to predict ionic-liquid diffraction patterns: Fixed-charge versus polarizable potentials, ChemPhysChem, vol. 16, p. 197-203, DOI: 10.1002/cphc.201402577 (2015).

Giudizio:

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è più buona, in accordo con l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un buon contributo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori.

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste a buona rilevanza editoriale. Le pubblicazioni evidenziano una buona originalità, rigore metodologico. Il contributo del candidato si può estrapolare dalla sua presenza come primo e ultimo nome in 19 delle 20 pubblicazioni selezionate come pure dalla sua indicazione come corresponding author in 9 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso MOLTO BUONA.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La produzione scientifica del candidato, che si è andata sviluppando nell'ambito della chimica computazionale, è di buon livello e congruente con il settore scientifico disciplinare CHIM/02. Si estende su un intervallo temporale ampio in articoli su riviste ISI (indice H di Hirsch =15 (SCOPUS)). In 23 dei 38 lavori pubblicati è presente come primo, ultimo nome, mentre è corresponding author in 10 lavori. Dei 38 lavori pubblicati 29 sono nel primo quartile (Q1) e 9 nel secondo quartile (Q2) (dati da Scimago Journal & Country Rank). Il numero di citazioni totali



(521) e quello medio (13,7) è buono (SCOPUS), l'Impact Factor totale: 122,36 (Journal of Citation Report).

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è pienamente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra un'attività scientifica di buona qualità, congruente con il bando, omogeneamente distribuita negli anni di attività. L'attività scientifica è caratterizzata da una buona produttività dalla quale si evince, in molte pubblicazioni, l'apporto fornito dal candidato testimoniato da un buon numero di articoli dove è presente come primo/ultimo nome e/o corresponding author. Il giudizio della produzione complessiva pertanto è: MOLTO BUONO.

COMMISSARIO 2 – Prof. GIANCOLA Concetta

TITOLI

Il candidato ha conseguito il dottorato di ricerca in Scienze dei Materiali presso l'Università di Roma "La Sapienza". Ha partecipato a 6 scuole nazionali e internazionali. Ha svolto 5 incarichi di ricerca come post-doc dal 2015 ad oggi presso l'Università di Pisa, il CNRS di Parigi, l'Università e il CNR di Roma. Complessivamente il candidato ha presentato 38 pubblicazioni su riviste internazionali e 6 comunicazioni a congresso (internazionali e nazionali), di cui 5 orali. È stato Editor per lo special Issue "Materials Science and X-Ray Diffraction" della rivista *Symmetry* e revisore per riviste pertinenti al settore CHIM/02. Il candidato ha inoltre svolto attività didattica tenendo un minicorso per gli studenti di PhD sui principi della quantomeccanica presso l'ENSCP Chimie ParisTech. Riporta, inoltre, l'assistenza ai corsi di chimica e fisica per la laurea triennale in Scienze Naturali durante il suo periodo di dottorato. Il candidato ha inoltre svolto attività di assistenza di una tesi di laurea e di una tesi di dottorato nel settore CHIM/02. Il giudizio complessivo sui titoli è BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Lavoro 1: M. Campetella, N. De Mitri, G. Prampolini, Automated parameterization of quantummechanically derived force-fields including explicit sigma holes: A pathway to energetic and structural features of halogen bonds in gas and condensed phase, *Journal of Chemical Physics*, vol. 53, pag. 044106, DOI: 10.1063/5.0014280 (2020).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 2: M. Campetella, N. M. Nguyen, J. Baima, L. Maschio, F. Mauri, M. Calandra, Hybridfunctional electronic structure of multilayer graphene, *Physical Review B*, vol. 101, p. 165437, DOI: 10.1103/PhysRevB.101.165437 (2020).

Giudizio:



La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una ottima collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 3: M. Campetella, J. S. Garcia, Following the Evolution of Excited States along Photochemical Reaction Pathways, *The Journal of Computational Chemistry*, Vol. 41, p. 1156-1164, DOI: 10.1002/jcc.26162 (2020).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 4: M. Campetella, F. Cappelluti, L. Gontrani, Medium Range Interactions Evidences in Compounds with Aliphatic Lateral Chain: 1-Pentanoic Acid, 1-Pentanol and Pentylammonium Nitrate as Test Cases, *Chemical Physics Letters*, vol. 734, p. 136738, DOI: 10.1016/j.cplett.2019.136738 (2019).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una discreta collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore e corresponding author.

Lavoro 5: J. S. Garcia, M Boggio-Pasqua, I. Ciofini, M. Campetella, Excited State Tracking During the Relaxation of Coordination Compounds. *The Journal of Computational Chemistry*, vol. 40, 1420–1428, DOI: 10.1002/jcc.25800 (2019).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo ultimo autore e co-corresponding author.

Lavoro 6: M. Campetella, A. Perfetto, I. Ciofini, Quantifying partial hole-particle distance at the excited state: A revised version of the DCT index, *Chemical Physics Letters*, vol. 714, p. 81-86, DOI: 10.1016/j.cplett.2018.10.060 (2019).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una discreta collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 7: M. Campetella, A. Mariani, C. Sadun, B. Wu, E.W. Castner Jr, L. Gontrani, Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 148, p. 134507, DOI: 10.1063/1.5021868 (2018).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.



Lavoro 8: M. Campetella, A. Le Donne, M. Daniele, L. Gontrani, S. Lupi, E. Bodo, F. Leonelli, Hydrogen bonding features in cholinium-based protic ionic liquids from molecular dynamics simulations, *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 122, p. 2635-2645, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12455 (2018).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 9: M. Campetella, F. Maschietto, M.J. Frisch, G. Scalmani, I. Ciofini, C. Adamo, Charge transfer excitations in TDDFT: A ghost-hunter index, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 38, p. 2151-2156, DOI: 10.1002/jcc.24862 (2017).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 10: L. Gontrani, R. Caminiti, U. Salma, M. Campetella, A structural and theoretical study of the alkylammonium nitrates forefather: Liquid methylammonium nitrate, *Chemical Physics Letters*, vol. 684, p. 304-309, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.07.017 (2017).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale discreta e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo ultimo autore e co-corresponding author.

Lavoro 11: M. Campetella, M. Macchiagodena, L. Gontrani, B. Kirchner, Effect of alkyl chain length in protic ionic liquids: an AIMD perspective, *Molecular Physics*, vol. 115, p. 1582-1589, DOI: 10.1080/00268976.2017.1308027 (2017).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una buona collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore e corresponding author.

Lavoro 12: M. Campetella, M. Montagna, L. Gontrani, E. Scarpellini, E. Bodo, Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 19, p. 11869-11880, DOI: 10.1039/C7CP01050H (2017).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una ottima collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 13: L. Gontrani, E. Scarpellini, R. Caminiti, M. Campetella, Bio ionic liquids and water mixtures: a structural study, *RSC Advances*, vol. 7, p.19338-19344, DOI: 10.1039/C6RA28545G (2017).

Giudizio:



La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo ultimo autore e co-corresponding author.

Lavoro 14: M. Campetella, D. C. Martino, E. Scarpellini, L. Gontrani, Low-q peak in x-ray patterns of choline-phenylalanine and-homophenylalanine: A combined effect of chain and stacking, *Chemical Physics Letters*, vol. 660, p. 99-101, DOI: 10.1016/j.cplett.2016.08.015 (2016).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una discreta collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 15: M. Campetella, D. Bovi, R. Caminiti, L. Guidoni, L. Bencivenni, L. Gontrani, Structural and vibrational study of 2-methoxyethylammonium nitrate (2-omeean): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 145, p. 024507, DOI: 10.1063/1.4956459 (2016).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 16: M. Campetella, E. Bodo, M. Montagna, S. De Santis, L. Gontrani, Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. ab initio simulations of their condensed phases, *The Journal of Chemical Physics* vol. 144, p. 104504, DOI: 10.1063/1.4943197 (2016).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 17: M. Campetella, E. Bodo, R. Caminiti, A. Martino, F. D'Apuzzo, S. Lupi, L. Gontrani, Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 142, p. 234502, DOI: 10.1063/1.4922442 (2015).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

Lavoro 18: M. Campetella, S. De Santis, R. Caminiti, P. Ballirano, C. Sadun, L. Tanzi, L. Gontrani, Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?, *RSC Advances*, vol. 5, p. 50938-50941, DOI: 10.1039/C5RA07567J (2015).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.



Lavoro 19: S. De Santis, G. Masci, F. Casciotta, R. Caminiti, E. Scarpellini, M. Campetella, L. Gontrani, Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physicochemical characterization, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 17, p. 20687-20698, DOI: 10.1039/C5CP01612F (2015).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo del candidato non è enucleabile.

Lavoro 20: M. Campetella, L. Gontrani, F. Leonelli, L. Bencivenni, R. Caminiti, Two different models to predict ionic-liquid diffraction patterns: Fixed-charge versus polarizable potentials, *ChemPhysChem*, vol. 16, p. 197-203, DOI: 10.1002/cphc.201402577 (2015).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo del candidato è chiaramente enucleabile essendo primo autore.

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate dal dottor Campetella sono pertinenti al settore scientifico disciplinare CHIM/02, si collocano per la maggior parte nel quartile Q1, tranne tre in Q2, e molte di esse sono dotate di un impact factor uguale o maggiore di 3, tranne cinque. Il contributo individuale è molto buono, essendo il candidato primo o ultimo autore (tranne in una pubblicazione) e corresponding author in nove pubblicazioni. La valutazione complessiva è MOLTO BUONA.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

L'attività scientifica, sviluppata nel campo della chimica teorico-computazionale, si è recentemente focalizzata sulle proprietà elettroniche e strutturali di differenti materiali con strutture 1D e 2D. Si è occupato inoltre di calcoli TDDFT sulla distanza particle-hole, variando la distanza tra accettore e donatore. Altre linee di ricerca hanno riguardato la simulazione dell'assorbimento eccitonico e di spettri di dicroismo circolare di proteine, utilizzando la dinamica molecolare, nonché lo sviluppo di un protocollo per la derivazione di parametri per un campo di forza da applicare a simulazioni di fasi condensate. Nel corso della sua attività di ricerca il candidato ha intrattenuto un buon numero di collaborazioni con qualificati gruppi di ricerca nazionali e internazionali. Le 38 pubblicazioni sono tutte pertinenti al settore scientifico disciplinare CHIM/02 con un HI di 15. Hanno raccolto un buon n. di citazioni totali di 521 e un n. medio di citazioni di 13.7, l'IF totale è di 122.36.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

Il complesso dell'attività scientifica del dott. Campetella è in linea con le tematiche del settore scientifico disciplinare CHIM/02, la produzione è continuativa e di buona qualità. Le pubblicazioni sono caratterizzate da un alto livello di originalità e rigore metodologico. In molte pubblicazioni è chiaramente individuabile il contributo del candidato, molto buona è anche la partecipazione a lavori con ricercatori stranieri. Il giudizio complessivo è MOLTO BUONO.



COMMISSARIO 3 – Prof. BOCCHINFUSO Gianfranco
TITOLI

Il candidato CAMPETELLA Marco ha conseguito le Laurea Magistrali in Chimica (Settembre 2006) e Fisica (Settembre 2011) presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Nell'Ottobre del 2014 ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze dei Materiali nel medesimo ateneo, discutendo una tesi dal titolo "Structural studies of ionic liquids by means of X-ray and theoretical methods". Dopo il dottorato, è risultato continuativamente titolare di 4 posizioni assimilabili agli assegni di ricerca per un totale di più di cinque anni presso Istituti accademici o di ricerca a Pisa (1 anno), Parigi (4 anni) e Roma (meno di un anno). Le linee di ricerca seguite in questi anni sono tutte riconducibili al SSD CHIM/02. Ha partecipato a sei brevi corsi di perfezionamento post-lauream. Ha maturato anche qualche esperienza di didattica avendo partecipato all'assistenza nella realizzazione di una tesi di Laurea Magistrale in Chimica (2015) e di una tesi di dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (2019) e tenendo un minicorso sui principi della meccanica quantistica per gli studenti di dottorato presso ENSCP Chimie ParisTech nel 2018. Ha inoltre presentato contributi orali o poster a sei conferenze tra il 2013 ed il 2018. Complessivamente, la analisi dei titoli restituisce l'immagine di un candidato con un profilo curriculare di buon livello per attività di ricerca svolta e continuità temporale. Dal punto di vista delle attività didattiche, il livello raggiunto appare discreto.

Il giudizio complessivo sui titoli è BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Lavoro 1: Nell'articolo "Automated parameterization of quantum-mechanically derived force-fields including explicit sigma holes: A pathway to energetic and structural features of halogen bonds in gas and condensed phase" [Journal of Chemical Physics, vol. 53, pag. 044106, (2020)] MC è primo nome di tre autori il cui ordine è alfabetico. Data il numero limitato di autori, il ruolo del candidato è senz'altro rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 2: Nell'articolo "Hybrid-functional electronic structure of multilayer graphene" [Physical Review B, vol. 101, p. 165437, (2020)] MC è primo nome di sei autori e risulta essere anche tra i "corresponding author" il ruolo del candidato è quindi senz'altro molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 3: Nell'articolo "Following the evolution of excited states along photochemical reaction pathways" [The Journal of Computational Chemistry, Vol. 41, p. 1156-1164, (2020)] MC è primo nome di due autori e risulta essere anche tra i "corresponding authors", il ruolo del candidato è quindi senz'altro molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.



Lavoro 4: Nell'articolo "Medium range interactions evidences in compounds with aliphatic lateral chain: 1-pentanoic acid, 1-pentanol and pentylammonium nitrate as test cases" [Chemical Physics Letters, vol. 734, p. 136738, (2019)] MC è primo nome di tre autori e risulta essere anche "corresponding author", il ruolo del candidato è quindi senz'altro molto rilevante. La collocazione editoriale è discreta. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02

Lavoro 5: Nell'articolo "Excited State Tracking during the Relaxation of Coordination Compounds" [The Journal of Computational Chemistry, vol. 40, 1420–1428, (2019)] MC è ultimo nome di quattro autori e risulta essere anche tra i "corresponding author", il ruolo del candidato è quindi senz'altro molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 6: Nell'articolo "Quantifying partial hole-particle distance at the excited state: A revised version of the DCT index" [Chemical Physics Letters, vol. 714, p. 81-86, (2019)] MC è primo nome di tre autori e risulta essere anche tra i "corresponding author", il ruolo del candidato è quindi senz'altro molto rilevante. La collocazione editoriale è discreta. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 7: Nell'articolo "Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques" [The Journal of Chemical Physics, vol. 148, p. 134507, (2018)] MC è primo nome di sei autori e risulta essere anche tra i "corresponding authors", il ruolo del candidato è quindi senz'altro molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 8: Nell'articolo "Hydrogen Bonding Features in Cholinium-Based Protic Ionic Liquids from Molecular Dynamics Simulations" [The Journal of Physical Chemistry B, vol. 122, p. 2635-2645, (2018).] MC è primo nome di sette autori, il ruolo del candidato è quindi senz'altro rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 9: Nell'articolo "Charge Transfer Excitations in TDDFT: A Ghost-Hunter Index" [Journal of Computational Chemistry, vol. 38, p. 2151-2156, (2017)] MC è primo nome di sei autori, il ruolo del candidato è quindi senz'altro rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 10: Nell'articolo "A structural and theoretical study of the alkylammonium nitrates forefather: Liquid methylammonium nitrate" [Chemical Physics Letters, vol. 684, p. 304-309, (2017)] MC è ultimo nome di quattro autori e



risulta essere anche tra i “corresponding authors”, il ruolo del candidato è quindi senz’altro molto rilevante. La collocazione editoriale è discreta. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 11: Nell’articolo “Effect of alkyl chain length in protic ionic liquids: an AIMD perspective” [Molecular Physics, vol. 115, p. 1582-1589, (2017).] MC è primo nome di quattro autori e “corresponding author”, il ruolo del candidato è quindi senz’altro molto rilevante. La collocazione editoriale è buona. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 12: Nell’articolo “Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations” [Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 19, p. 11869-11880, (2017)] MC è primo nome di cinque autori, il ruolo del candidato è quindi senz’altro rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 13: Nell’articolo “Bio ionic liquids and water mixtures: a structural study” [RSC Advances, vol. 7, p.19338-19344, (2017)] MC è ultimo nome di quattro autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo del candidato è quindi senz’altro molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 14: Nell’articolo “Low-Q peak in X-ray patterns of choline-phenylalanine and -homophenylalanine: A combined effect of chain and stacking” [Chemical Physics Letters, vol. 660, p. 99-101, (2016)] MC è primo nome di quattro autori, il ruolo del candidato è quindi senz’altro rilevante. La collocazione editoriale è discreta. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 15: Nell’articolo “Structural and vibrational study of 2-MethoxyEthylAmmonium Nitrate (2-OMeEAN): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics” [The Journal of Chemical Physics, vol. 145, p. 024507, (2016).] MC è primo nome di sei autori, il ruolo del candidato è quindi senz’altro rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 16: Nell’articolo “Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. Ab initio simulations of their condensed phases” [The Journal of Chemical Physics vol. 144, p. 104504, (2016).] MC è primo nome di cinque autori, il ruolo del candidato è quindi rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.



Lavoro 17: Nell'articolo "Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions" [The Journal of Chemical Physics, vol. 142, p. 234502, (2015).] MC è primo nome di sette autori, il ruolo del candidato è quindi senz'altro rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 18: Nell'articolo "Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?" [RSC Advances, vol. 5, p. 50938-50941, (2015).] MC è primo nome di sette autori, il ruolo del candidato è quindi rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 19: Nell'articolo "Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physico-chemical characterization" [Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 17, p. 20687-20698, (2015).] MC è tra sette autori, non si evince quindi un ruolo rilevante del candidato. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 20: Nell'articolo "Two Different Models to Predict Ionic-Liquid Diffraction Patterns: Fixed-Charge versus Polarizable Potentials" [ChemPhysChem, vol. 16, p. 197-203, (2015).] MC è primo nome di cinque autori, il ruolo del candidato è quindi rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Il candidato Marco Competella ha presentato 20 lavori pubblicati in un arco di tempo compreso tra il 2015 ed il 2020. In nove lavori il candidato risultava tra i "corresponding authors", in sedici lavori risulta essere primo nome e in 3 lavori ultimo nome. I lavori hanno complessivamente una collocazione editoriale molto buona; tutti risultano pienamente congrui con il settore scientifico CHIM/02. Nel complesso, i lavori presentati mostrano che il candidato ha raggiunto maturità ed indipendenza scientifica molte buone. Il giudizio complessivo sui venti lavori presentati è MOLTO BUONO.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato ha una produzione scientifica di buon livello, maturata prevalentemente nell'ambito della chimica teorica e computazionale, coerente quindi con il settore scientifico disciplinare CHIM/02. In 23 dei 38 lavori pubblicati è presente come primo, ultimo nome, mentre è corresponding author in 10 lavori. I dati bibliometrici relativi alla sua produzione sono: i) indice H di Hirsch pari a 15 (SCOPUS); ii) tutti i lavori sono pubblicati in riviste collocate nel primo quartile (Q1) o secondo quartile (Q2) (dati da Scimago Journal & Country Rank); iii) Il numero di citazioni totali è pari a 521 e quello medio pari a 13,7 (SCOPUS); iv) l'Impact Factor totale è pari a 122,36 (Journal of Citation Report).



VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è pienamente attinente al SSD CHIM/02 e di buona qualità. Risulta inoltre pienamente coerente con il settore concorsuale 03/A2 ed omogeneamente distribuita negli anni di attività. L'apporto del candidato è rilevante, come facilmente deducibile dal buon numero di articoli in cui risulta essere primo o ultimo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva pertanto è MOLTO BUONO.

GIUDIZIO COLLEGIALE

TITOLI

Valutazione dei Titoli

Il candidato CAMPETELLA Marco presenta titoli che sono congrui con i criteri del bando. L'analisi dei titoli evidenzia una buona esperienza di ricerca oltre che la capacità di interagire in contesti di ricerca di Istituzioni straniere. La valutazione del profilo basata sui titoli è BUONA.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono coerenti con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste di rilevanza editoriale più che buona. Il contributo individuale del candidato si può evincere dalla presenza del suo nome come primo e ultimo nome in 19 delle 20 pubblicazioni selezionate e in 9 pubblicazioni come corresponding author. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso MOLTO BUONA.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione scientifica del candidato si estende su un intervallo temporale molto ampio in articoli su riviste ISI (indice H di Hirsch =15 (SCOPUS)). In 23 dei 38 lavori pubblicati è presente come primo, ultimo nome, o corresponding author. Dei 38 lavori pubblicati 29 sono nel primo quartile (Q1) e 9 nel secondo quartile (Q2) (dati da Scimago Journal & Country Rank). Il numero di citazioni totali (521) e quello medio (13,7) è discreto (SCOPUS), l'Impact Factor totale: 122,36 (Journal of Citation Report). Il candidato dichiara 6 tra contributi orali (5) e 1 poster a convegni nazionali ed internazionali.

VALUTAZIONE DELLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

Alla luce delle valutazioni di cui sopra e dall'esame del profilo scientifico, si ritiene che il candidato sia provvisto dei titoli curriculari richiesti, che le pubblicazioni presentate dimostrino il raggiungimento di una buona maturità scientifica e una buona autonomia nello svolgimento dell'attività di ricerca. La valutazione sulla produzione scientifica complessiva è nel complesso MOLTO BUONA.

**CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina**

COMMISSARIO 1: MAZZEI Franco

TITOLI

La candidata MIGLIORATI Valentina si è laureata con lode in Chimica nel Settembre del 2006 presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza", mentre nel Dicembre 2009 ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche nel medesimo ateneo, con una tesi dal titolo: "A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration". Dal 2010 ad oggi è risultata titolare di una serie di contratti di assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Durante gli anni di permanenza in servizio come assegnista ha partecipato a numerosi progetti di ricerca universitari, locali e nazionali principalmente riconducibili al SSD CHIM/02. Ha partecipato ad una serie di corsi di perfezionamento post-lauream. Dal 2007 ad oggi la candidata ha svolto attività didattica di livello universitario consistente in: a) Contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico integrative, propedeutiche e di recupero presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza"; b) Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica – argomento del corso: Meccanica Quantistica) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza"; c) Assistenza nella supervisione di tesi di Laurea magistrale e triennale in chimica e nella supervisione di dottorandi di ricerca; d) Lezioni di "Metodi computazionali per lo studio di sistemi molecolari complessi" per gli studenti del corso di dottorato in Scienze Chimiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza"; e) Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza". La produzione scientifica, come pure la sua partecipazione a convegni in Italia e all'estero attesta l'impegno continuato e di rilievo nell'attività di ricerca. A testimonianza della autonomia scientifica della candidata, essa è stata responsabile scientifico di 5 progetti di ricerca e ha partecipato ad altri 7 progetti di ricerca. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata mette in luce un profilo curriculare di ottimo livello, sia per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta, che per la parallela attività didattica che le è stata affidata per la sua competenza nelle discipline oggetto dei corsi del Dipartimento di appartenenza. Il giudizio complessivo sui titoli è: OTTIMO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Lavoro 1: V. Migliorati, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019).

Giudizio:

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un



contributo significativo, come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 2: V. Migliorati, A. Caruso, Paola D'Angelo.

Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019).

Giudizio:

L'argomento della pubblicazione è congruo con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è più che buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un contributo significativo, come si evince dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come corresponding author.

Lavoro 3: F. Sessa, V. Migliorati, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo.

On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻ based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018).

Giudizio:

Il lavoro affronta una tematica in linea con il settore disciplinare. La rivista è di buon livello, considerando l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il contributo fornito dalla candidata è significativo in base alla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 4: V. Migliorati, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo.

Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017).

Giudizio:

L'argomento di ricerca oggetto di questa pubblicazione è coerente con il settore disciplinare CHIM/02. Si osserva una collocazione della rivista più che buona, in base all'I.F. e al suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un contributo significativo come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 5: V. Migliorati, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo.

Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water, INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017).

Giudizio:

La tematica affrontata mostra coerenza con il settore disciplinare. Il livello della rivista è più che buono, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il contributo della candidata è stato significativo come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come corresponding author.



Lavoro 6: V. Migliorati, P. D'Angelo.

Unraveling the Sc 3+ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule, *INORGANIC CHEMISTRY*, 55, 6703-6711 (2016).

Giudizio:

La tematica del lavoro è congrua con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è più che buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La prima posizione nell'elenco degli autori e la sua indicazione come corresponding author testimoniano il significativo contributo dalla candidata.

Lavoro 7: A. Serva, V. Migliorati, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo.

Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 18, 16544-16554 (2016).

Giudizio:

La ricerca realizzata in questa pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. Si può notare un ottimo livello della rivista, in accordo con l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La contributo della candidata è significativo come dimostrato come dimostrato dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 8: F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati.

The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*, 119, 15729–15737 (2015).

Giudizio:

Il presente lavoro è coerente con il settore disciplinare oggetto del concorso. La collocazione della rivista è buona, in base all'I.F. e al suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Si può ritenere significativo il contributo della candidata come dimostrato dall'ultima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come corresponding author.

Lavoro 9: V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo.

Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 17, 16443-16453 (2015).

Giudizio:

La tematica affrontata è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è ottima, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un contributo significativo come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 10: V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo.

Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 17, 2464-2474 (2015).



Giudizio:

La tematica oggetto di questa pubblicazione è congrua con il settore disciplinare. La rivista è di ottimo livello, in base all'I.F. e al suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata, che figura come primo nome nell'elenco degli autori ed è indicata come co-corresponding author ha fornito un contributo significativo.

Lavoro 11: V. Migliorati, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014).

Giudizio:

Si può notare una piena coerenza della pubblicazione con il settore disciplinare. La rivista ha una buona collocazione, in accordo con l'I.F. e con il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha contribuito significativamente considerando la prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 12: V. Migliorati, P. D'Angelo.

A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg 2+ ion solvation properties in methanol solution, RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013).

Giudizio:

La tematica affrontata è congrua con il settore disciplinare oggetto del Concorso. La rivista è di buon livello, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. È significativo il contributo della candidata come si evince dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come corresponding author.

Lavoro 13: V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti.

A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013).

Giudizio:

L'argomento di ricerca oggetto della pubblicazione è coerente con il settore disciplinare CHIM/02. La collocazione della rivista è buona, in base all'I.F. e al suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il contributo della candidata è significativo come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 14: V. Migliorati, A. Zitolo, P. D'Angelo.

Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013).

Giudizio:

Il lavoro è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation



Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un contributo significativo in base alla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 15: P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati.

Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013).

Giudizio:

La tematica della ricerca affrontata in questo lavoro è coerente con il settore disciplinare. La rivista è di buon livello, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un contributo significativo in base all'ultima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 16: V. Migliorati, M. Mancini, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, P. D'Angelo. Hydration properties of the Zn 2+ ion in water at high pressure, INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1141-1150 (2013).

Giudizio:

La pubblicazione affronta un argomento coerente con il settore disciplinare. Si può considerare più che buona la collocazione della rivista, tenendo conto dell'I.F. e del suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata, in base alla sua presenza come primo nome nell'elenco degli autori e come co-corresponding author, ha fornito un contributo significativo.

Lavoro 17: V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, R. Caminiti.

Crystal polymorphism of hexylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 116, 2104-2113 (2012).

Giudizio:

La tematica affrontata è congrua con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, considerando l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un contributo significativo come si evince dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 18: V. Migliorati, A. Zitolo, G. Chillemi, P. D'Angelo.

Influence of the second coordination shell on the XANES spectra of Zn(II) ion in water and methanol,, CHEMPLUSCHEM, 77, 234-239 (2012).

Giudizio:

Il lavoro affronta una tematica coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, in accordo con l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Si può ritenere significativo il contributo della candidata, testimoniato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.



Lavoro 19: V. Migliorati, G. Chillemi, P. D'Angelo.

On the Solvation of the Zn $2+$ Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach, *INORGANIC CHEMISTRY*, 50, 8509-8515 (2011).

Giudizio:

L'argomento oggetto di questo lavoro è congruo con il settore disciplinare. La rivista ha un livello più che buono, in base all'I.F. e al suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un contributo significativo come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come co-corresponding author.

Lavoro 20: V. Migliorati, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo. Effect of the Zn $2+$ and Hg $2+$ Ions on the Structure of Liquid Water, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*, 115, 4798-4803 (2011).

Giudizio:

La tematica della pubblicazione è coerente con il settore disciplinare oggetto di questo Concorso. È buona la collocazione della rivista, considerando l'I.F. e il suo posizionamento nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science è altresì significativo il contributo fornito dalla candidata come dimostrato come dimostrato dalla prima posizione nell'elenco degli autori e dalla sua indicazione come corresponding author.

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono pienamente coerenti con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste una più che buona rilevanza editoriale. Le pubblicazioni sono contraddistinte da un'ottima originalità e rigore metodologico. Il contributo del candidato si può estrapolare dalla sua presenza come primo e ultimo nome in 18 delle 20 pubblicazioni selezionate e in tutte come corresponding author. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è OTTIMA.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La produzione scientifica della candidata è di ottimo livello e congruente con il settore scientifico disciplinare CHIM/02. Si estende su un intervallo temporale molto ampio oltre che differenziarsi in modo significativo in articoli su riviste ISI (indice H di Hirsch =24 (SCOPUS)). La candidata è presente come primo nome e ultimo nome in 28 su 52 lavori pubblicati. È corresponding author in 26 pubblicazioni. Dei 52 lavori pubblicati 42 sono nel primo quartile (Q1) e 8 nel secondo quartile (Q2) (dati da Scimago Journal & Country Rank). Ha inoltre due contributi su libri scientifici. Il numero di citazioni totali (1281) e quello medio (24,6) è più che buono come pure l'Impact Factor totale: 186,68 (Journal of Citation Report).

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica della candidata, che si è sviluppata principalmente nell'ambito nel campo delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati



con l'uso di tecniche computazionali e spettroscopiche, è pienamente attinente al SSD CHIM/02. La candidata dimostra un'attività scientifica di ottima qualità, congruente con il bando, molto numerosa ed omogeneamente distribuita negli anni. L'attività scientifica è caratterizzata da un'ottima produttività dalla quale si evince, in molte pubblicazioni, il buon apporto fornito, e testimoniato dal notevole numero di articoli dove è presente come primo/ultimo nome e/o corresponding author. Tre pubblicazioni sono state selezionate come ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF). Inoltre, la candidata ha conseguito, nel 2017, l'Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Fisica (settore concorsuale 03/A2 - Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche). Ha conseguito inoltre, abilitazioni scientifiche in altri settori di area chimica. Il giudizio sulla produzione complessiva pertanto è OTTIMO.

COMMISSARIO 2 – Prof. GIANCOLA Concetta

TITOLI

La candidata Valentina Migliorati ha conseguito il dottorato di ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Roma "La Sapienza". Ha svolto 8 incarichi di ricerca come assegnista presso la stessa Università. La candidata ha partecipato a 4 corsi di perfezionamento post-laurea. Complessivamente la dott.ssa Migliorati ha presentato 52 pubblicazioni su riviste internazionali e 12 comunicazioni a congressi sia internazionali che nazionali, di cui 5 orali, tra queste una su invito. La candidata ha inoltre svolto una cospicua attività didattica presso l'Università di Roma "La Sapienza" tenendo un corso di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica nel settore CHIM/02 per il corrente anno accademico e il corso di "Metodi computazionali per lo studio di sistemi molecolari complessi" per gli studenti del corso di dottorato in Scienze Chimiche nell'A.A. 2019/2020. Ha tenuto inoltre lezioni di Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II per il Corso di Laurea Triennale in Chimica dall'anno accademico 2007/2008 fino all'anno accademico 2015/2016 e nell'anno accademico 2017/2018. Ha inoltre contribuito alla supervisione di due tesi di dottorato e 8 tesi di laurea in Chimica nell'arco temporale 2012-2018. Ha usufruito anche di un contratto di tutorato per attività didattico-integrative, propedeutiche e di recupero nell'anno accademico 2006/2007. È stata responsabile scientifico di un progetto di ricerca per l'avvio alla ricerca e di 4 progetti per l'assegnazione di ore di calcolo; ha inoltre partecipato a 7 progetti di ricerca. Ha svolto attività di revisore per diverse riviste pertinenti al settore CHIM/02. La candidata ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di professor associato nel settore concorsuale 03/A2, di particolare interesse per questa valutazione. Ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di professor associato anche in altri settori dell'area 03. Il giudizio globale sulla qualità dei titoli è OTTIMO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Lavoro 1: V. Migliorati, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular



dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 2: V. Migliorati, A. Caruso, Paola D'Angelo.

Unraveling the Hydration Properties of the Ba 2+ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e corresponding author.

Lavoro 3: F. Sessa, V. Migliorati, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo.

On the coordination of Zn 2+ ion in Tf2 N - based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo co-corresponding author.

Lavoro 4: V. Migliorati, A. Filippini, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo.

Structure of Water in Zn 2+ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 5: V. Migliorati, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo.

Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water, INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e corresponding author.

Lavoro 6: V. Migliorati, P. D'Angelo.

Unraveling the Sc 3+ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule, INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016).

Giudizio:



La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e corresponding author.

Lavoro 7: A. Serva, V. Migliorati, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo co-corresponding author.

Lavoro 8: F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati.

The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo l'ultimo autore e corresponding author.

Lavoro 9: V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo.

Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 10: V. Migliorati, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo.

Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 11: V. Migliorati, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.



Lavoro 12: V. Migliorati, P. D'Angelo.

A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg 2+ ion solvation properties in methanol solution, RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e corresponding author.

Lavoro 13: V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti.

A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 14: V. Migliorati, A. Zitolo, P. D'Angelo.

Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 15: P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati.

Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo ultimo autore e co-corresponding author.

Lavoro 16: V. Migliorati, M. Mancini, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, P. D'Angelo. Hydration properties of the Zn 2+ ion in water at high pressure, INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1141-1150 (2013).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 17: V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, R. Caminiti.



Crystal polymorphism of hexylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*, 116, 2104-2113 (2012).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 18: V. Migliorati, A. Zitolo, G. Chillemi, P. D'Angelo.

Influence of the second coordination shell on the XANES spectra of Zn(II) ion in water and methanol., *CHEMPLUSCHEM*, 77, 234-239 (2012).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una discreta collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

Lavoro 19: V. Migliorati, G. Chillemi, P. D'Angelo.

On the Solvation of the Zn 2+ Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach, *INORGANIC CHEMISTRY*, 50, 8509-8515 (2011).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha un'ottima collocazione editoriale e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e corresponding author.

Lavoro 20: V. Migliorati, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo. Effect of the Zn 2+ and Hg 2+ Ions on the Structure of Liquid Water, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*, 115, 4798-4803 (2011).

Giudizio:

La pubblicazione è pertinente al settore CHIM/02, ha una collocazione editoriale molto buona e il contributo della candidata è chiaramente enucleabile essendo primo autore e co-corresponding author.

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni selezionate dalla dottoressa Migliorati sono pertinenti al settore scientifico disciplinare CHIM/02, tutte si collocano nel quartile Q1 (tranne una in Q2) e tutte hanno un impact factor uguale o maggiore di 3. Sono caratterizzate da un elevato livello di originalità e rigore metodologico. Il contributo individuale è ragguardevole, essendo la candidata corresponding author in tutte le pubblicazioni e nella quasi totalità di esse anche primo o ultimo autore. La valutazione complessiva sulle pubblicazioni selezionate per la presente valutazione è OTTIMA.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La dott.ssa Migliorati ha prodotto 52 pubblicazioni nell'arco della sua attività scientifica di cui due contributi in libri scientifici. È presente come primo o ultimo autore in più della metà dell'intera produzione scientifica. Le pubblicazioni sono caratterizzate da una continuità temporale e da un'ottima collocazione nel panorama internazionale. I



parametri bibliometrici sono riassuntivi dell'elevata qualità dell'attività scientifica della candidata: H index = 24, n. di citazioni totali = 1281, n. di citazioni medio =24.6.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

L'attività scientifica della dott.ssa Migliorati si è sviluppata principalmente nel campo delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati con l'uso di tecniche computazionali, quali la dinamica molecolare, e metodologie spettroscopiche, quali l'assorbimento ai raggi X, la diffrazione dei raggi X e le spettroscopie EXAFS e XANES. La combinazione di queste tecniche è stata applicata allo studio di diversi sistemi, tra questi le soluzioni acquose di ioni metallici ad alte pressioni, l'idratazione degli ioni alogenuro e i liquidi ionici. Nel corso della sua attività di ricerca la candidata ha intrattenuto un proficuo numero di collaborazioni con qualificati gruppi di ricerca nazionali e internazionali. L'ottimo livello dell'attività di ricerca è testimoniato dal cospicuo numero di pubblicazioni in cui la candidata è presente come primo o ultimo autore e/o come corresponding author.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica è OTTIMO.

COMMISSARIO 3 – Prof. BOCCHINFUSO Gianfranco

VALUTAZIONE TITOLI

La candidata MIGLIORATI Valentina ha conseguito con lode la laurea in Chimica nel Settembre del 2006 presso l'Università degli Studi Roma "La Sapienza" e nel Dicembre 2009, presso lo stesso ateneo ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche discutendo una tesi dal titolo: "A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration". Dal 2010 ad oggi è risultata titolare di una serie di 10 contratti di assegno di ricerca tutti svolti presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Nello stesso periodo ha partecipato a 12 progetti di ricerca coordinandone 5 ed ha partecipato a quattro brevi corsi di perfezionamento post-lauream in Italia (3) e all'estero (1). Ha inoltre svolto una buona attività didattica sia durante il dottorato che negli anni successivi in corsi di laurea triennale, magistrale e dottorale. In particolare, è risultata titolare di un corso per la Laurea Magistrale in Chimica Analitica presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza" ed ha prestato assistenza nella supervisione di tesi di Laurea triennale, Magistrale in Chimica e di dottorato. La produzione scientifica così come la partecipazione a convegni nazionali ed internazionali è rilevante e continua e denota inoltre una indipendenza molto buona della candidata. Alla luce di queste considerazioni. il profilo curricolare della candidata risulta essere di ottimo livello, sia nell'ambito della ricerca scientifica che in quello della didattica.

Il giudizio complessivo sui titoli è OTTIMO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Lavoro 1: Nell'articolo " Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: a molecular dynamics simulation and EXAFS investigation" [PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019).] VM è primo nome di sei autori e risulta essere tra i "corresponding authors", il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il



lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 2: Nell'articolo "Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy" [INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019)] VM è primo nome di tre autori e risulta essere "corresponding author", il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 3: Nell'articolo "On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation" [PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018).] VM è tra i "corresponding authors", il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 4: Nell'articolo "Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study" [INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017).] VM è primo nome di cinque autori e risulta essere tra i "corresponding authors", il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 5: Nell'articolo "Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water" [INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017).] VM è primo nome di quattro autori e risulta essere tra i "corresponding authors", il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 6: L'articolo "Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule" [INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016).] è un lavoro a due autori, di cui VM è primo nome e "corresponding author", il suo ruolo è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 7: L'articolo "Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight" [PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016).] è un lavoro a sei nomi in cui VM risulta tra i "corresponding authors", il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 8: Nell'articolo "Hidden Hydration Structure of Halide Ions: an Insight into the Importance of Lone Pairs" [JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B,



119, 15729–15737 (2015).] VM è ultimo nome di quattro autori e risulta essere “corresponding author”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 9: Nell’articolo “ Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study” [PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015).] VM è primo nome di cinque autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidato è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 10: Nell’articolo “ Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid” [PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015).] VM è primo nome di sette autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 11: Nell’articolo “ Unraveling halide hydration: A high dilution approach” [JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014).] VM è primo nome di quattro autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 12: L’articolo “ A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg²⁺ ion solvation properties in methanol solution” [RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013).] è un lavoro a due soli nomi in cui VM è primo nome e “corresponding author”, il suo ruolo quindi è molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 13: Nell’articolo “ A Combined Theoretical and Experimental Study of Solid Octyl and Decylammonium Chlorides and of Their Aqueous Solutions” [JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013)] VM è primo nome di sei autori e risulta essere tra i “corresponding author”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 14: Nell’articolo “ Using a Combined Theoretical and Experimental Approach to Understand the Structure and Dynamics of Imidazolium-Based Ionic Liquids/Water Mixtures. 1. MD Simulations” [JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013).] VM è primo nome di tre autori e risulta



essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 15: Nell’articolo “ Using a Combined Theoretical and Experimental Approach to Understand the Structure and Dynamics of Imidazolium-Based Ionic Liquids/Water Mixtures. 2. EXAFS Spectroscopy” [JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013).] VM è ultimo nome di quattro autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 16: Nell’articolo “ Hydration Properties of the Zn²⁺ Ion in Water at High Pressure” [INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1141-1150 (2013).] VM è primo nome di otto autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 17: Nell’articolo “ Crystal Polymorphism of Hexylammonium Chloride and Structural Properties of Its Mixtures with Water” [JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 116, 2104-2113 (2012).] VM è primo nome di quattro autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 18: Nell’articolo “ Influence of the Second Coordination Shell on the XANES Spectra of the Zn²⁺ Ion in Water and Methanol” [CHEMPLUSCHEM, 77, 234-239 (2012).] VM è primo nome di quattro autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è discreta. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 19: Nell’articolo “ On the Solvation of the Zn²⁺ Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach” [INORGANIC CHEMISTRY, 50, 8509-8515 (2011).] VM è primo nome di tre autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per i contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.

Lavoro 20: Nell’articolo “ Effect of the Zn_{2p} and Hg_{2p} Ions on the Structure of Liquid Water” [JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 115, 4798-4803 (2011).] VM è primo nome di cinque autori e risulta essere tra i “corresponding authors”, il ruolo della candidata è quindi molto rilevante. La collocazione editoriale è ottima. Il lavoro, per collocazione editoriale e contenuti, è pienamente congruo con il settore scientifico CHIM/02.



VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

La candidata Valentina Migliorati ha presentato 20 lavori pubblicati in un arco di tempo compreso tra il 2011 e 2019. In tutti i lavori la candidata risulta tra i "corresponding authors", in sedici lavori risulta essere primo nome e in 2 ultimo nome. Tutti i lavori hanno una ottima collocazione editoriale e risultano pienamente congrui con il settore scientifico CHIM/02. Nel complesso, i lavori presentati mostrano che la candidata ha raggiunto una ottima maturità ed indipendenza scientifica. Il giudizio complessivo sui venti lavori presentati è OTTIMO.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La produzione scientifica della candidata si estende regolarmente nell'arco temporale tra il 2008 ed oggi, è di ottimo livello ed è congruente con il settore scientifico CHIM/02. La candidata è presente come primo nome e ultimo nome in 28 su 52 lavori pubblicati. È corresponding author in 26 pubblicazioni. La produzione scientifica, che comprende anche due contributi su libri scientifici, è caratterizzata dai seguenti dati bibliometrici: i) indice H di Hirsch = 24 (SCOPUS); ii) i 52 lavori pubblicati sono tutti classificabili nel primo (Q1) e secondo quartile (Q2) (dati da Scimago Journal & Country Rank); iii) il numero di citazioni totali è pari a 1281 e quello medio 24,6; iv) l'Impact Factor totale: 186,68 (Journal of Citation Report).

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

Dalla produzione scientifica si evince che la candidata ha utilizzato sia tecniche computazionali che sperimentali, applicate in massima parte allo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati. La produzione scientifica è omogeneamente distribuita nel tempo e di ottima qualità e risulta inoltre pienamente congrua con il settore scientifico CHIM/02, come testimoniato dal fatto che la candidata ha conseguito la Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Fisica anche nel settore 03/A2, in aggiunta ad analoghe Abilitazione conseguite anche in altri settori di area chimica. L'apporto della candidata ai lavori presentati è molto rilevante, risultando spesso primo/ultimo nome e/o corresponding author.

Il giudizio sulla produzione complessiva pertanto è OTTIMO.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione dei Titoli

La candidata MIGLIORATI Valentina presenta titoli che sono largamente congrui con i criteri del bando. L'analisi dei titoli evidenzia un'ottima esperienza nell'attività didattica e in quella di ricerca, come testimoniata anche dal numero di progetti di ricerca di cui è stata responsabile scientifico o partecipante. La valutazione del profilo basata sui titoli è OTTIMA.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono congrue con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste di rilevanza editoriale ottima. Il



contributo individuale della candidata si può evincere dalla sua presenza come primo e ultimo nome in 18 delle 20 pubblicazioni selezionate e in tutte come corresponding author. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è OTTIMA.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione scientifica della si estende su un intervallo temporale molto ampio oltre che differenziarsi in modo significativo in articoli su riviste ISI (indice H di Hirsch =24 (SCOPUS)). La candidata è presente come primo nome e ultimo nome in 28 su 52 lavori pubblicati, ed è corresponding author in 26 pubblicazioni. 42 dei 52 lavori pubblicati sono nel primo quartile (Q1) mentre 8 sono nel secondo quartile (Q2) (dati da Scimago Journal & Country Rank). Il numero di citazioni totali (1281) e quello medio (24,6) è più che buono come pure l'Impact Factor totale: 186,68 (Journal of Citation Report). Tre pubblicazioni sono state selezionate come ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF). La candidata dichiara 12 tra contributi orali (5, di cui uno con invito) e poster (7) a convegni nazionali ed internazionali.

VALUTAZIONE DELLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

Alla luce delle valutazioni di cui sopra e dall'esame del profilo scientifico, si ritiene che la candidata sia largamente provvista dei titoli curriculari richiesti, che le pubblicazioni presentate dimostrino il raggiungimento di un'ottima maturità scientifica e autonomia nello svolgimento dell'attività di ricerca. La valutazione sulla produzione scientifica complessiva è OTTIMA.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 18,30

Letto, confermato e sottoscritto.

Firma del Commissari

Prof. Franco Mazzei

Prof.ssa Concetta Giancola

Prof. Gianfranco Bocchinfuso

