

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Paola D'Angelo
Curriculum Vitae
ai fini della pubblicazione

Place: Roma

Date: 23/10/2019

Parte I - General Information

Full Name	Paola D'Angelo
Spoken Languages	Italiano, Inglese

Part II - Education and National Scientific Habilitations

Type	Year	Institution	Notes (Degree, Experience,...)
University graduation	1990	Sapienza Università di Roma	Laurea in Chimica, 110/110 e lode
Post-graduate studies	1993	EMBL- Amburgo	Borsa di studio EMBO di due mesi
PhD	1994	Sapienza Università di Roma	Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche
Specialty	1993-94	EMBL- Amburgo	Borsa di studio di 14 mesi della CEE nell'ambito del progetto "Capitale Umano e Mobilità" per lavorare presso la linea EXAFS dell'EMBL presso il sincrotrone dell'HASYLAB di Amburgo.
Abilitazione Scientifica Nazionale 03/A2	2014	MIUR	Bando 2012 (D.D. n. 222/2012). Conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia, nel settore concorsuale 03/A2 Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, SSD CHIM/02.
Abilitazione Scientifica Nazionale 03/B1	2014	MIUR	Bando 2012 (D.D. n. 222/2012). Conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia, nel settore concorsuale 03/B1 Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici, SSD CHIM/03.
Abilitazione Scientifica Nazionale 03/A2	2018	MIUR	Bando 2016 (D.D. n. 1532/2016). Conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia, nel settore concorsuale 03/A2 Modelli e Metodologie per le

Allegato F - Paola D'AngeloDecreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Abilitazione Scientifica Nazionale 03/B1	2018	MIUR	Scienze Chimiche, SSD CHIM/02. Bando 2016 (D.D. n. 1532/2016). Conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia, nel settore concorsuale 03/B1 Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici, SSD CHIM/03.
Abilitazione Scientifica Nazionale 02/B1	2018	MIUR	Bando 2016 (D.D. n. 1532/2016). Conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia, nel settore concorsuale 02/B1 - Fisica Sperimentale della Materia, SSD FIS/01

Part IIa- Periodi di Congedo per Maternità

27/07/2004- 27/12/2004	Congedo per maternità (Legge 30/12/71 n. 1204) DR n. 2988, foglio n. 707 del 25/07/2005
15/06/2007- 19/11/2007	Congedo per maternità (Legge 30/12/71 n. 1204) DR n. 13584 del 07/03/2008

Part III - Appointments

IIIA - Academic Appointments

Start	End	Institution	Position
1995	2004	Sapienza Università di Roma	Ricamatore Universitario fascia SSD CHIM/02 presso il Dipartimento di Chimica
2005	oggi	Sapienza Università di Roma	Professore II fascia SSD CHIM/02 presso il Dipartimento di Chimica

IIIB - Other Academic Appointments

Start	End	Institution	Position
2002	2002	Università degli Studi di Napoli Federico II	Membro della commissione della procedura di valutazione comparativa ad un posto di Ricamatore Universitario settore scientifico disciplinare CHIM/02 nominata con DR del 07/05/2002, Gazzetta Ufficiale - 4a Serie Speciale - n. 4 del 15-1-2002.
2003	2003	Swedish University of Agricultural Science di Uppsala, Svezia.	Membro della Commissione giudicatrice per l'esame finale per il

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

2006	2006	Sapienza Università di Roma	conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca in Chimica
2006	2006	Sapienza Università di Roma	Membro effettivo della Commissione di accesso al Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, XXII ciclo, pubblicato sulla G.U. n° 46 - IV serie speciale - del 20/6/2006
2009	2009	Sapienza Università di Roma	Membro effettivo della Commissione di accesso al Dottorato di Ricerca in Scienza dei Materiali, 25° ciclo, pubblicato sulla G.I. n° 47 - IV serie speciale - del 23/6/2009
2010	2010	Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne Svizzera	Membro della Commissione giudicatrice per l'esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca in Chimica
2012	oggi	Sapienza Università di Roma	Membro del collegio docenti del corso di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza"
2013	2013	Università degli Studi di Torino	Membro della Commissione giudicatrice per l'esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca in "Scienza e Alta Tecnologia" indirizzo "Scienza e Tecnologia dei Materiali e dei Nanosistemi" - XXV ciclo DR n. 83 del 17/01/2013
2014	2014	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione giudicatrice delle prove di ammissione alla Scuola Superiore di Studi Avanzati Sapienza, DR n. 1/2014
2015	2015	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione giudicatrice delle prove di ammissione alla Scuola Superiore di Studi Avanzati Sapienza, DR n. 4/2015
2016	oggi	Sapienza Università di Roma	Nomina a Junior Research Fellow della Scuola Superiore di Studi Avanzati Sapienza
2016	2016	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione giudicatrice delle prove di ammissione alla Scuola Superiore di Studi Avanzati Sapienza
2016	2016	Università degli Studi di Torino	Membro della Commissione giudicatrice per l'esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

			Ricerca in Scienze Chimiche e dei Materiali - XXVIII ciclo DR n. 44 11/01/2016
2016	2016	Università degli Studi di Napoli Federico II	Membro della Commissione giudicatrice per l'esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche - XXVIII ciclo
2017	2017	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione giudicatrice delle prove di ammissione alla Scuola Superiore di Studi Avanzati Sapienza
2017	2017	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione giudicatrice delle prove di ammissione alla Scuola Superiore di Studi Avanzati Sapienza
2017	2017	Università degli Studi di Torino	Membro della Commissione giudicatrice per l'esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche e dei Materiali - XXX ciclo DR n. 3590 26/10/2017
2017	2018	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione Ricerca di Ateneo DR n. 1383/2017
2018	2018	Università degli Studi di Udine	Membro della Commissione giudicatrice degli esami finali di Dottorato di Ricerca in "Scienze dell'ingegneria energetica e ambientale" XXX ciclo, DR n. 81/2018 del 13/02/2018
2017	2018	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione Spazio del Dipartimento di Chimica
2018	2018	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione giudicatrice delle prove di ammissione alla Scuola Superiore di Studi Avanzati Sapienza
2019	oggi	Sapienza Università di Roma	Membro della Commissione Relazioni Triennali Ricercatori del Dipartimento di Chimica
2019	oggi	Sapienza Università di Roma	Presidente della Commissione Manutenzione e Riorganizzazione Spazi del Dipartimento di Chimica
2019	2019	Università degli Studi di Torino	Membro della Commissione giudicatrice per la selezione pubblica a n. 1 posto di Ricercatore a tempo

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

determinato ai sensi dell'art. 24, comma 3, lett. a) della legge n. 240/2010 - settore concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche) - s.s.d. CHIM/02 (Chimica fisica DR n. 3201 del 31/07/2019

Part IV - Teaching experience

Year	Institution	Lecture/Course
a.a. 2002- 2003	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica quarto corso (V anno del corso di Laurea in Chimica) 9 CFU
a.a. 2003- 2004	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica quarto corso (V anno del corso di Laurea in Chimica) 9 CFU
a.a. 2003- 2004	Sapienza Università di Roma	Tecnologia per l'Informatica Chimica (III anno del corso di Laurea specialistica in Chimica Computazionale) 6 CFU
a.a. 2004- 2005	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica quarto corso (V anno del corso di Laurea in Chimica) 9CFU
a.a. 2004- 2005	Sapienza Università di Roma	Meccanica Statistica (I anno del corso di Laurea specialistica in Chimica Computazionale) 5 CFU
a.a. 2005- 2006	Sapienza Università di Roma	Spettroscopia dei Sistemi Biologici II (I anno del corso di Laurea specialistica in Chimica dei Sistemi Biologici) 6CFU
a.a. 2005- 2006	Sapienza Università di Roma	Meccanica Statistica (I anno del corso di Laurea specialistica in Chimica Computazionale) 5 CFU
a.a. 2005- 2006	Sapienza Università di Roma	Laboratorio di Chimica Fisica (I anno della Laurea triennale in Chimica Industriale) 3 CFU
a.a. 2006- 2007	Sapienza Università di Roma	Spettroscopia dei Sistemi Biologici II (I anno del corso di Laurea specialistica in Chimica dei Sistemi Biologici) 6CFU
a.a. 2006- 2007	Sapienza Università di Roma	Meccanica Statistica (I anno del corso di Laurea specialistica in Chimica Computazionale) 5 CFU
a.a. 2007- 2008	Sapienza Università di Roma	Spettroscopia dei Sistemi Biologici II (I anno del corso di Laurea specialistica in Chimica dei Sistemi Biologici) 6CFU
a.a. 2007- 2008	Sapienza Università di Roma	Meccanica Statistica (I anno del corso di Laurea specialistica in Chimica Computazionale) 5 CFU

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

a.a. 2007- 2008	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2008- 2009	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2009- 2010	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2010- 2011	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2011- 2012	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2012- 2013	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2013- 2014	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2014- 2015	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2015- 2016	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2016- 2017	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2016- 2017	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica I (AL) (II anno della Laurea triennale in Chimica esercitazioni Laboratorio) 6 CFU
a.a. 2017- 2018	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2017- 2018	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica Canale 1 (I anno della Laurea triennale in Biotecnologie Agro Industriali) 6 CFU
a.a. 2017- 2018	Scuola Normale Superiore di Pisa	Applied Spectroscopy
a.a. 2018- 2019	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) 9 CFU
a.a. 2018- 2019	Sapienza Università di Roma	Chimica Fisica Canale 1 (I anno della Laurea triennale in Biotecnologie Agro Industriali) 6 CFU

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Part V - Other teaching experiences

VA - Relatore Tesi di Dottorato

Year	Institution	Description
a.a. 2004- 2007	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze Chimiche XX Ciclo del Dott. Giordano Mancini: "Studio strutturale e dinamico di soluzioni acquose elettrolitiche attraverso metodi computazionali e spettroscopia di assorbimento dei raggi X"
a.a. 2006- 2009	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze Chimiche XXII Ciclo della Dott.ssa Valentina Migliorati: "A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration"
a.a. 2007- 2010	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze Chimiche XXIII Ciclo del Dott. Andrea Zitolo: "Structural investigation of lanthanoid coordination: a combined XAS and Molecular Dynamic study"
a.a. 2009- 2012	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze Chimiche XXV Ciclo della Dott.ssa Serena De Santis: "Joined application of computational and experimental methods to the structural and dynamic study of proteins"
a.a. 2012- 2015	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze Chimiche XXVIII Ciclo del Dr. Valentino Russo dal titolo "Studio delle proprietà di singola particella delle soluzioni acqua-metanolo tramite diffusione di neutroni e dinamica molecolare"
a.a. 2014- 2017	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze dei Materiali XXX Ciclo della Dr.ssa Alessandra Serva dal titolo "Ionic liquids as solvents for rare-earth metals: a combined XAS and Molecular Dynamics study"
a.a. 2015- 2018	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze Chimiche XXXI Ciclo del Dr. Francesco Sessa dal titolo "X-Ray Absorption Spectroscopy & Molecular Dynamics: investigating the properties of metal cation solvation complexes in challenging liquid media"
a.a. 2018- 2019	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Dottorato in Scienze Chimiche XXXII Ciclo della Dr.ssa Anastasiia Dulina dal titolo "Multivariate Analysis in the Study of the Chemical Processes"

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

VB - Relatore Tesi di Laurea Magistrale

a.a. 2002- 2003	Sapienza Università di Roma	Relatore della Tesi di Laurea in Chimica della studentessa Debora Lucarelli: "Determinazione della geometria di coordinazione del ferro in composti modello porfirinici ed in flavoemoglobine batteriche attraverso la spettroscopia di assorbimento dei raggi X"
a.a. 2002- 2003	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Otello Maria Roscioni: "Effetti del disordine strutturale sugli spettri XANES: studio di soluzioni acquose"
a.a. 2003- 2004	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Giordano Mancini: "Studio strutturale della geometria di idratazione del Cd(II) mediante l'uso combinato di metodi computazionali e spettroscopia di assorbimento dei raggi X"
a.a. 2003- 2004	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica della studentessa Alessandra Calzetta: "Analisi strutturale della geometria di coordinazione del ferro in composti porfirinici modello e emoproteine tramite la spettroscopia di assorbimento dei raggi X"
a.a. 2005- 2006	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica della studentessa Valentina Migliorati: "Studio strutturale e dinamico di soluzioni acquose di Hg ²⁺ e Cd ²⁺ attraverso metodi computazionali e spettroscopia di assorbimento dei raggi X"
a.a. 2005- 2006	Sapienza Università di Roma	A.A. 2005-2006: Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Simone Tatoli: "Studio della struttura e della dinamica di idratazione dello ione Zn ²⁺ in acqua liquida e compressa"
a.a. 2006- 2007	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Andrea Zitolo: "Studio dei complessi di idratazione dei lantanidi nei cristalli idrati ed in soluzione acquosa attraverso la spettroscopia di assorbimento dei raggi X"
a.a. 2013- 2014	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica della studentessa Alessandra Serva: "Studio delle proprietà strutturali e dinamiche di Liquidi Ionici"
a.a. 2013- 2014	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Francesco Sessa: "Proprietà strutturali e dinamiche delle sfere di idratazione degli ioni alogenuro"
a.a. 2013- 2014	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Simone Pezzotti: "Organizzazione strutturale di miscele liquido ionico-acqua"
a.a. 2017-	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica di Alessandro Caruso : "Un approccio quantistico"

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

2018		allo sviluppo di campi di forza per la descrizione delle proprietà di idratazione dello ione Ba^{2+}
a.a. 2018-2019	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Francesco Tavani : "Studio di reazioni chimiche attraverso tecniche di spettroscopia XAS, UV-Vis e di analisi statistica multivariata"
a.a. 2018-2019	Sapienza Università di Roma	Relatore della tesi di Laurea in Chimica dello studente Giuseppe Fazio: "Studio strutturale della solvatazione di $HgCl_2$ in diversi solventi mediante spettroscopia XAS"

a.a. 1998/1999 - ad oggi: membro delle commissioni di Laurea in Chimica, Sapienza Università di Roma, Roma, IT.

Part VI - Awards and Honors

Year	Title
1990	Vincitrice del premio Enimont per il curriculum laurea (prima classificata).
1991	Vincitrice del premio "Federchimica - per un futuro intelligente" per la tesi di laurea
2003	Vincitrice dello "Young Scientist Award" della International Union of Crystallography consegnato durante la "12th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure" (Malme, Sweden, 22 -27 Giugno 2003)
2007	L'articolo "Evidence for sevenfold coordination in the first solvation shell of Hg (II) aqua ion" JACS 129, 5430-5436 (2007) è stato selezionato come Editor Choice di Science 316, 516 (2007).
2010	L'articolo "Hydration Properties of the Bromide Aqua Ion: the Interplay of First Principle and Classical Molecular Dynamics, and X-ray Absorption Spectroscopy" (P. D'Angelo, V. Migliorati, L. Guidoni, Inorg. Chem. 49, 4224 (2010) doi:10.1021/ic9025574) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli ESRF HIGHLIGHTS 2010
2012	Invito a scrivere una review sulla rivista scientifica "Chemistry - A European Journal" dal titolo "Hydration of lanthanoids(III) and actinoids(III): An experimental/theoretical saga".
2015	L'articolo "The non-octarepeat copper binding site of the prion protein is a key regulator of prion conversion" (G. Giachin, P.T. Mai, T.H. Tran, G. Salzano, F. Benetti, V. Migliorati, A. Arcovito, S. della Longa, G. Mancini, P. D'Angelo, G. Legname, Sci Rep. 5, 15253 (2015) doi:10.1038/srep15253) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli ESRF HIGHLIGHTS 2015
2016	L'articolo "How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study" (A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo, Chem. Eur. J. 23, 8424, 2017) è stato selezionato per la pubblicazione dell'Inside Back Cover (DOI: 10.1002/chem.201701561) dalla rivista Chemistry - a European Journal.
2016	Invito a scrivere il capitolo "XAS in Liquid Systems" per il libro "X-Ray Absorption and X-Ray Emission Spectroscopy - Theory and Applications" edito dalla Wiley.
2016	Nomina a Junior Research Fellow della Classe Accademica di Scienze e Tecnologie della Scuola Superiore di Studi Avanzati dell'Università di Roma "La Sapienza" dal 2016.

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

2017	L'articolo "Following a chemical reaction on the millisecond time scale by simultaneous X-ray and UV/Vis spectroscopy" (G. Olivo, A. Barbieri, V. Dantignana, F. Sessa, V. Migliorati, M. Monte, S. Pascarelli, T. Narayanan, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, P. D'Angelo, J. Phys. Chem. Lett. 8, 2958, 2017) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli Spotlight on Science e negli ESRF HIGHLIGHTS 2017
2017	Premio per l'eccellente insegnamento universitario, terza edizione della Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturale della Sapienza, Università di Roma - 29 Marzo 2017.
2018	L'articolo "On the coordination of Zn ²⁺ ion in Tf ₂ N based ionic liquids: structural and dynamic properties" (F. Sessa, V. Migliorati, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini and P. D'Angelo, Physical Chemistry Chemical Physics, 4, 2662-2675, 2018) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone Elettra di Trieste ed è stato incluso negli Elettra Highlights 2017-2018
2019	L'articolo "Coupled X-ray absorption/UV-vis monitoring of fast oxidation reactions Involving a nonheme iron-oxo comple" (G. Capocasa, F. Sessa, F. Tavani, M. Monte, G. Olivo, S. Pascarelli, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, P. D'Angelo, J. Am. Chem. Soc. 141, 2299-2304, 2019) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli Spotlight on Science dell'ESRF 2019

Part VII - Society memberships

Year	Title
2002-oggi	SILS - Società Italiana Luce di Sincrotrone
2009-oggi	Società Chimica Italiana
2009-oggi	International X-Ray Absorption Society

Part VIII - Participation to International Scientific Committees

Year	Title
2009-oggi	Membro del Comitato Esecutivo della "International X-Ray Absorption Society"
2009-oggi	Membro del Review Committee "Hard condensed matter Structures" del sincrotrone Elettra di Trieste
2009-2010	Membro del Review Panel presso il Sincrotrone Soleil di Parigi
2012-2014	Membro del Beam Time Allocation Panel C04 del sincrotrone ESRF di Grenoble
2018	Membro del Review Committee della ESRF-CRG beamline BM20 presso il sincrotrone ESRF di Grenoble
2018-oggi	Membro della Giunta Esecutiva della Società Italiana Luce di Sincrotrone (SILS).
2018-oggi	Membro del Beam Time Allocation Panel C11 del sincrotrone ESRF di Grenoble

Part IXa - Scientific Responsibility of Research Fellows ("Assegni di Ricerca")

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

Year	Institution	Description
2010-2011	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Titolo della Ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati"- Dott.ssa Valentina Migliorati
2011-2012	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Titolo della Ricerca: "Studi XAS di sistemi disordinati"- Dott. Andrea Zitolo
2011-2012	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati"- Dott.ssa Valentina Migliorati
2012-2013	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Studi XAS di sistemi disordinati"- Dott. Andrea Zitolo
2012-2013	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati"- Dott.ssa Valentina Migliorati
2013-2014	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Studi XAS di sistemi disordinati"- Dott. Andrea Zitolo
2013-2014	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati"- Dott.ssa Valentina Migliorati
2014-2015	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati"- Dott.ssa Valentina Migliorati
2015-2016	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Titolo della Ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati-teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi"- Dott.ssa Valentina Migliorati
2016-	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la

Allegato F - Paola D'AngeloDecreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

2017		collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati-teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi"- Dott.ssa Valentina Migliorati
2017-2018	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 assegno per la collaborazione ad attività di ricerca della durata 1 anno. Proseguimento della Ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati-teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi"- Dott.ssa Valentina Migliorati

Part IXb - Scientific Responsibility of Research Fellows ("Borse di Ricerca")

Year	Institution	Description
2010-2011	Sapienza Università di Roma	Responsabile scientifico di n. 1 borsa di studio per la collaborazione ad attività di ricerca della durata di 4 mesi. Titolo della Ricerca: "Studio delle proprietà strutturali di liquidi ionici attraverso l'uso della spettroscopia di assorbimento dei raggi X"- Dott. Andrea Zitolo

Part X National and International Meetings and Workshops Communications and Organization

Part Xa Oral Communications

Year	Conference	Oral Communication
2000	"The 11th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFSXI)", Aki, Giappone. 26-31 Luglio 2000.	EXAFS and Molecular Dynamics studies of ionic solutions
2003	"Advances in experimental and theoretical methods for biological applications of Synchrotron Radiation", Frascati (LNF), Italia. 27 Febbraio-1 Marzo 2003.	Advanced methods in the XAS data analysis
2004	"Acta Biophysica Romana", Roma, Italia. 17-18 Giugno 2004.	Unusual heme Iron-lipid acyl chain coordination in Escherichia coli Flavohemoglobin
2010	International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices - ILED-2 " Roma, Italia. 9-11 Giugno 2010.	Local structure of ionic liquids probed by EXAFS

Part Xb Invited Speaker

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

Year	Conference	Oral Communications
2005	Invited Speaker presso "14th International Symposium, Spectroscopy in Theory and Practice 2005", Nova Gorica, Slovenia, 10-13 Aprile 2005	New developments in the quantitative structural analysis of XAS data
2006	Invited Speaker presso "Chimie théorique et simulations des seuils d'Absorption X: application aux éléments 5f", Avignone, Francia, 14-15 Settembre 2006.	Advanced methods in the XAS data analysis
2009	Invited Speaker al "XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana", Sorrento, Italia, 5-10 Luglio 2009.	Advanced Combined techniques in the structural investigation of ions in solution: the symbiosis XAS-Molecular Dynamics
2009	Invited Speaker presso "The 14th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS14)", Camerino, Italia, 26-31 Luglio 2009.	Combined techniques in the structural investigation of ions in solution: the symbiosis XAS-Molecular Dynamics
2012	Invited Speaker presso "The 15th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS15)", Beijing, Cina, 22-28 Luglio 2012.	Advanced Combined techniques in the structural investigation of ions in solution: the symbiosis XAS-Molecular Dynamics
2012	Invited Speaker presso la Conferenza "Frontiers in water biophysics", Perugia, Italia, 23-26 Settembre 2012.	On the solvation of ions in high-density water
2015	Keynote Speaker presso "The 16th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS16)", Karlsruhe, Germania. 23-28 Agosto 2015.	Advanced Combined techniques in the structural investigation of ions in solution: the symbiosis XAS-Molecular Dynamics
2015	Invited Speaker presso "International joint school: smart nanomaterials and X-ray optics 2015. Modeling, synthesis and diagnostics", Rostov-on-Don, Russia, 27-30 Settembre 2015.	Short range structure in disordered systems: the XAS point of view
2016	Keynote Speaker presso "XXIV SILS (Società italiana luce di Sinctrotrone) meeting 2016" Bari, Italia, 21-23 Settembre 2016.	Understanding hydration properties in liquid solutions by XAS and molecular dynamics simulations
2016	Invited Speaker presso il "IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana" Scuola Normale Superiore di Pisa, Italia, 3-5 Ottobre 2016.	The structure of liquids: an insight from XAFS and Molecular Dynamics
2017	Invited Speaker presso il "Workshop ERC: Development of a Research Environment for Advanced Modelling of Soft Matter" Anacapri, Italia, 20-22 Aprile 2017.	What can we learn on chemical systems from X-ray absorption spectroscopy?
2018	Keynote Speaker presso 'The 17th International Conference on X-ray	Structural properties of disordered systems: a combined Molecular Dynamics and XAS approach

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

	Absorption Fine Structure (XAFS17)" Cracovia, Polonia, 22 -27 Luglio 2018	
2019	Plenary Lecture presso "36th International Conference on Solution Chemistry" Xining, China. 4-8 Agosto 2019.	Understanding Solvation Properties in Liquid Solutions by XAS and Molecular-Dynamics Simulations

Part Xc Conference Organization

Year	Conference	Activity
1999	Workshop "Advanced Training Course in the use of Fluorescence X-ray Absorption Spectroscopy in Biology." Amburgo, Germania, 16-20 Giugno 1999.	Chair
2006	Simposio "X-Ray Absorption Spectroscopy of Porphyrins, Hemes and Hemoproteins" nella conferenza "ICPP 4 International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines " Roma, Italia. 2006.	Membro del Comitato Organizzatore
2009	"The 14th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS14)", Camerino, Italia, 26-31 Luglio 2009.	Membro del "International Program Committee"
2015	"The 16th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS16)", tenutasi a Karlsruhe, Germania. 23-28 Agosto 2015.	Membro del "International Advisory and Program Committee"
2018	"3rd Joint AIC-SILS conference" Roma, Italia, 25-28 Giugno 2018.	Membro del Comitato Scientifico
2018	"The 17th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS17)" Cracovia, Polonia, 22-27 Luglio 2018.	Membro del "International Advisory Committee"
2019	XLVII Congresso DCF (Divisione di Chimica Fisica) Roma, Italia, 1-4 Luglio 2019.	Membro del Comitato Organizzatore
2019	SILS 2019 Meeting, Camerino, Italia, 9-11 Settembre 2019.	Membro del Comitato Scientifico

Part XI - Reviewer for International Journals

Journal of American Chemical Society
Physical Review Letters
Inorganic Chemistry
Chemistry A European Journal
Journal of Synchrotron Radiation
Physical Review B
Australian Journal of Chemistry

Allegato F - Paola D'AngeloDecreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Journal of Physical Chemistry A
Journal of Physical Chemistry B
PROTEINS: Structure, Function, and Bioinformatics
Pure and Applied Chemistry
Electrophoresis
Inorganica Chimica Acta
PCCP

Part XII - Scientific Evaluator for International Projects

Year	Title
2009-oggi	Valutatrice dei Proposals del sincrotrone Elettra di Trieste per il comitato "Hard condensed matter Structures"
2009-2010	Valutatrice dei Proposals della beamlines EXAFS presso il Sincrotrone Soleil di Parigi
2012-2014	Valutatrice dei proposals del sincrotrone ESRF di Grenoble per il Panel C04
2017	Valutatrice per il National Science Center, Poland del progetto "Tracking chemical reaction dynamics with ultrafast X-ray spectroscopies: applications to photooxidation and photocatalysis processes" No. 345320
2018-oggi	Valutatrice dei proposals del sincrotrone ESRF di Grenoble per il Panel C11
2019	Valutatrice per l'Estonian Research Council del progetto "Separation of Minor Actinides and Lanthanides: Rational Approach Based on Physical Chemistry" PRG792

Part XIII - National collaborations:

Prof. Vincenzo Barone, Dr. Giordano Mancini, Scuola Normale Superiore di Pisa.
Dott. Stefano della Longa del Dipartimento di Medicina Sperimentale, Università dell'Aquila
Prof. Alessandro Arcovito dell'Università Cattolica del Sacro Cuore di Roma.
Prof. Leonardo Guidoni, Dipartimento di Chimica, Ingegneria Chimica e dei materiali, Università degli studi dell'Aquila.
Dott.ssa Giuliana Aquilanti, Sincrotrone Elettra di Trieste.
Prof. Giuseppe Legname alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) di Trieste.
Prof. Adriano Filippini, Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche, Università degli Studi dell'Aquila.
Prof. Andrea di Cicco, Scuola di Scienze e Tecnologie, Università di Camerino
Dott. Simone de Panfilis, Centre for Life Nano Science - IIT, Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza".
Prof. Alberto Boffi, Dipartimento di Biochimica dell'Università di Roma "La Sapienza"

Part XIV - Interational collaborations:

Allegato F - Paola D'AngeloDecreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Prof. Ingmar Persson and Dr. Daniel Lundberg, Department of Chemistry and Biotechnology, Swedish University of Agricultural Sciences, Uppsala, Svezia.
Dr. Jean Louis Hazemann, Dr. Olivier Proux CNRS Grenoble
Dr. Riccardo Spezia Laboratoire de Chimie Théorique CNRS Sorbonne Université, France.
Dott.ssa Sakura Pascarelli, Sincrotrone ESRF di Grenoble.
Prof.ssa Melissa A. Denecke dell'Università di Manchester.

Part XIV - Fellowship at International Institutions

Year	Institution
1994-1995	Fellowship della CEE nell'ambito del progetto "Capitale Umano e Mobilità" svolta all'European Molecular Biology Laboratory presso il sincrotrone HASYLAB di Amburgo durata 13 mesi.
2001	Fellowship dell'European Synchrotron Radiation Facility di Grenoble per svolgere attività di ricerca presso questo sincrotrone durata 2 mesi.

Part XV - Editorial board:

Year	Journal
2018-oggi	Associate Editor della rivista Radiation Physics and Chemistry - Elsevier
2019	Guest Editor per Lo Special Issue "Asian Conference on X-ray Absorption Spectroscopy 2019" sulla rivista Radiation Physics and Chemistry - Elsevier

Part XVI - Funding Information [grants as PI-principal investigator or I-investigator]

XVIa- Finanziamenti ottenuti come PI-principal investigator

Year	Title	Program	Role	Grant value
2002-2005	Studi strutturali di soluzioni mediante spettroscopia di assorbimento dei raggi x e simulazioni di dinamica molecolare prot. C26F025920 C26F032457, C26F041083, C26F057284	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	PI	5.825 €
2009	"Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati" prot. C26R09HR25	Assegno di ricerca dell'Ateneo Federato di Scienza e della Tecnologia AST Sapienza Università di Roma	PI	18.600 €
2013	The coordination chemistry of lanthanides and actinides in task specific ionic liquids: a combined experimental and theoretical investigation prot. C26A129ZAY	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	PI	64.000 €
2014	The coordination chemistry of lanthanides and actinides in complex liquids: a combined XAS and MD investigation prot. C26A13K8AN	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	PI	3.000 €
2015	The role of metal ions in the prion conversion of different human prion	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di	PI	50.000 €

Allegato F - Paola D'AngeloDecreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

2016	protein variants prot. C26A14L7CX Hydrogen Peroxide Activation by Non-Heme Iron Complexes: A Route for Sustainable and Selective Oxidation Processes prot. C26H159F5B	Roma Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	PI	30.000 €
2016	Deep eutectic mixtures: a new generation of green solvents RM116154C8D7E4D0	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	PI	36.600 €
2019	Cutting-edge X-ray methods and models for the understanding of surface site reactivity in heterogeneous catalysts and sensors	PRIN 2017 - MIUR	PI-Responsabil e Unità	101.355 €
2019	Finanziamento Professori Visitatori per la Ricerca - Dott. Kirill Lomachenko	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	PI	5.000 €

XVIa- Finanziamenti ottenuti come I- investigator

2002	"Struttura e proprieta' di sistemi biocompatibili tensioattivo-macromolecola" prot. C26A021272	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	I	20.000 €
2003	"Struttura e proprieta' di sistemi biocompatibili tensioattivo-macromolecola" prot. C26A034379	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	I	25.000 €
2004	"Struttura e proprieta' di sistemi biocompatibili tensioattivo-macromolecola" prot. C26A044992	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	I	25.000 €
2005	"Struttura e proprieta' di sistemi biocompatibili tensioattivo-macromolecola" prot. C26A052472	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	I	25.000 €
2006	"Struttura e proprieta' di sistemi biocompatibili tensioattivo-macromolecola" prot. C26A06BEXZ	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	I	23.000 €
2011	Diffratometro a raggi x "new d8 advance for high energy diffraction" analisi a raggi x di sistemi nanocompositi, amorfi, soluzioni, liquidi e cinetiche di trasformazione sotto stress termico" prot. C26A10H5T8	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	I	50.000 €
2011	The structure of metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies" prot. C26A11SMBW	Progetti di Ricerca - Sapienza Università di Roma	I	80.000 €

Part VII - Research Activities

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

La Prof.ssa Paola D'Angelo dirige di gruppo di Ricerca XAMD (<https://www.chem.uniroma1.it/dangelo/index.html>) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". Il gruppo è attualmente composto da due Assegnisti di Ricerca, da uno studente di dottorato di ricerca in Scienze Chimiche e da numerosi studenti. L'attività di ricerca riguarda la caratterizzazione strutturale di sistemi disordinati e proteici attraverso una metodologia combinata di spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) e metodi computazionali messa a punto dalla sottoscritta nel corso degli anni. In particolare nei primi anni di ricerca è stata sviluppata la teoria della spettroscopia di assorbimento dei raggi X, per applicare tale tecnica sperimentale allo studio di soluzioni. È stata evidenziata la presenza di effetti di eccitazione multiple alle soglie K ed L di molti elementi. Sono stati sviluppati metodi innovativi di analisi dei dati per tener conto di tali effetti. In seguito è stata messa a punto una metodologia di integrazione della spettroscopia EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) con simulazioni di Dinamica Molecolare classica e quantistica. Tale metodo ha fornito uno strumento nuovo e innovativo per lo studio strutturale di sistemi disordinati e in particolare di soluzioni ioniche. È stato in parte sviluppato e testato un nuovo programma di analisi dei dati XANES (X-ray Absorption Near Edge Spectroscopy). Questo è il primo metodo che permette di estrarre informazioni strutturali quantitative dalla zona a bassa energia degli spettri di assorbimento dei raggi X. Inoltre è stato messo a punto un nuovo metodo di analisi degli spettri XANES in combinazione con informazioni di Dinamica Molecolare che si è rivelato uno strumento essenziale per far luce su dettagli strutturali accurati di sistemi disordinati. Gli strumenti innovativi sviluppati sono stati applicati in diversi ambiti della chimica:

- Studi strutturali di soluzioni ioniche Sono state studiate in dettaglio le proprietà strutturali e dinamiche di soluzioni ioniche in vari solventi di diversi ioni metallici alcalini e di transizione, lantanidi, attinidi e alogenuri. Sono stati inoltre studiati complessi di alcuni metalli con amminoacidi e polipeptidi.

- Studio di sistemi proteici attraverso la spettroscopia di assorbimento dei raggi X e simulazioni di Dinamica Molecolare. È stato messo a punto un metodo di analisi quantitativo della struttura di coordinazione del sito attivo in emoproteine, superossido dismutasi, neuroglobina, proteina prionica combinando le spettroscopie EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure), XANES e Dinamica Molecolare

- Studio di Liquidi Ionici attraverso la spettroscopia XAS- La spettroscopia XAS è stata utilizzata per ottenere informazioni strutturali su liquidi ionici puri e in miscele con acqua e in presenza di ioni. collaborazioni, sono descritti nei punti successivi di questo titolo e nel titolo successivo nei quali sono anche specificate anche alcune delle relative pubblicazioni.

Infine è stata messa a punto una innovativa metodologia che permette di effettuare studi cinetici di reazioni bimolecolari in soluzione combinando le spettroscopie XAS e UV-Vis ed è stata sviluppata una procedura di analisi multivariata ad hoc per isolare gli spettri XANES degli intermedi di reazioni. L'attività di ricerca è testimoniata dalle pubblicazioni scientifiche prodotte ed elencate nell'allegato E.

Allegato F - Paola D'AngeloDecreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Product type	Number	Data Base	Start	End
Numero complessivo di lavori	129	SCOPUS	1991	2019
Numero complessivo di lavori ricalcolato considerando i due periodi di congedo maternità*	133	SCOPUS	1991	2019
Numero di lavori negli ultimi 10 anni	71	SCOPUS	2009	2019
Indice Hirsch (H) complessivo	38	SCOPUS	1991	2019
Indice Hirsch (H) complessivo ricalcolato considerando i due periodi di congedo maternità*	38			
Indice Hirsch (H) degli ultimi 15 anni	30	SCOPUS	2004	2019
Indice Hirsch (H) degli ultimi 15 anni ricalcolato considerando i due periodi di congedo maternità*	31	SCOPUS	2004	2019
Numero totale delle citazioni	3637	SCOPUS	1991	2019
Numero totale delle citazioni ricalcolato considerando i due periodi di congedo maternità*	3742	SCOPUS	1991	2019
Numero delle citazioni degli ultimi 15 anni	2407	SCOPUS	2004	2019
Numero delle citazioni degli ultimi 15 anni ricalcolato considerando i due periodi di congedo maternità*	2535	SCOPUS	2004	2019
Numero medio delle citazioni per pubblicazione	28,19	SCOPUS	1991	2019
Impact factor totale**	444.769			
Impact factor medio per pubblicazione**	3.44			
Numero di lavori pubblicati come corresponding author	66			

*Calcolato utilizzando la definizione dell'articolo 2, comma 3 del D.M. 602/2016

**Calcolato in relazione all'anno di pubblicazione

Part IX- Selected Publications

Lista delle 16 pubblicazioni selezionate per la valutazione nell'arco temporale di 10 anni antecedenti al bando con decorrenza dal 1° gennaio (2009-2019).

Impact factor: banca dati di riferimento; InCites Journal Citation Reports. L'I.F. è relativo all'anno di pubblicazione, o, se non disponibile, a quello più vicino. Citazioni: banca dati di riferimento; SCOPUS. 7

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

delle 16 pubblicazioni selezionate sono state pubblicate negli ultimi 5 anni a partire dal 1° gennaio del quinto anno anteriore all'anno di pubblicazione del bando. L'I.F. totale delle pubblicazioni selezionate è: 92.65 mentre l'I.F. medio è: 5.79. Le citazioni totali sono: 516, mentre il valore medio delle citazioni è: 32.25.

S1) Paola D'Angelo,* Andrea Zitolo, Valentina Migliorati, Ingmar Persson
Analysis of the Detailed Configuration of Hydrated Lanthanoid(III) Ions in Aqueous Solution and Crystalline Salts by Using K- and L-3-Edge XANES Spectroscopy.
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, vol. 16, p. 684-692, (2010).
ISSN: 0947-6539, doi: 10.1002/chem.200900122

Impact Factor	Citazioni
5.476	62

S2) Paola D'Angelo,* Valentina Migliorati, Leonardo Guidoni
Hydration Properties of the Bromide Aqua Ion: the Interplay of First Principle and Classical Molecular Dynamics, and X-ray Absorption Spectroscopy.
INORGANIC CHEMISTRY, vol. 49, p. 4224-4231, (2010).
ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/ic9025574

Impact Factor	Citazioni
4.326	61

S3) Paola D'Angelo,* Stefano Della Longa, Alessandro Arcovito, Massimiliano Anselmi, Alfredo Di Nola, Giovanni Chillemi
Dynamic Investigation of Protein Metal Active Sites: Interplay of XANES and Molecular Dynamics Simulations.
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 132, p. 14901-14909, (2010).
ISSN: 0002-7863, doi: 10.1021/ja1056533

Impact Factor	Citazioni
9.023	17

S4) Paola D'Angelo,* Andrea Zitolo, Valentina Migliorati, Giovanni Chillemi, Magali Duvail, Pierre Vitorge, Abadie Sacha, Riccardo Spezia
Revised Ionic Radii of Lanthanoid(III) Ions in Aqueous Solution. INORGANIC CHEMISTRY, vol. 50, p. 4572-4579, (2011).
ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/ic200260r

Impact Factor	Citazioni
4.601	115

S5) Andrea Zitolo, Giovanni Chillemi, Paola D'Angelo*
X-ray absorption study of the solvation structure of Cu²⁺ in methanol and dimethyl sulfoxide.
INORGANIC CHEMISTRY, vol. 51, p. 8827-8833, (2012).
ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/ic3006647

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Impact Factor	Citazioni
4.593	13

S6) Paola D'Angelo,* Riccardo Spezia

Hydration of Lanthanoids(III) and Actinoids(III): An Experimental/Theoretical Saga.

CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, vol. 18, p. 11162-11178, (2012).

ISSN: 0947-6539, doi: 10.1002/chem.201200572

Impact Factor	Citazioni
5.831	89

S7) Paola D'Angelo,* Fausto Martelli, Riccardo Spezia, Adriano Filipponi, Melissa A. Denecke

Hydration properties and ionic radii of actinide(III) ions in aqueous solution.

INORGANIC CHEMISTRY, vol. 52, p. 10318-10324, (2013).

ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/ic400678u

Impact Factor	Citazioni
4.794	49

S8) Paola D'Angelo,* Valentina Migliorati, Riccardo Spezia, Simone De Panfilis, Ingmar Persson, Andrea Zitolo

K-edge XANES investigation of octakis(DMSO)lanthanoid(iii) complexes in DMSO solution and solid iodides.

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, vol. 15, p. 8684-8691, (2013).

ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/c3cp50842k

Impact Factor	Citazioni
4.198	13

S9) Valentina Migliorati, Andrea Zitolo, Paola 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, CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 117, p. 12505-12515, (2013).

ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/jp4048677

Impact Factor	Citazioni
3.377	39

S10) Paola D'Angelo,* Valentina Migliorati, Ingmar Persson, Giordano Mancini, Stefano Della Longa
Quantitative Analysis of Deconvolved X-ray Absorption Near-Edge Structure Spectra: A Tool To Push the Limits of the X-ray Absorption Spectroscopy Technique.

INORGANIC CHEMISTRY, vol. 53, p. 9778-9784 (2014).

ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/ic501366d

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019
Codice Concorso 2019POR031

Impact Factor	Citazioni
4.762	6

S11) Gabriele Giachin, Phuong Thao Mai, Thanh Hoa Tran, Giulia Salzano, Federico Benetti, Valentina Migliorati, Alessandro Arcovito, Stefano Della Longa, Giordano Mancini, Paola D'Angelo,* Giuseppe Legname

The non-octarepeat copper binding site of the prion protein is a key regulator of prion conversion.

SCIENTIFIC REPORTS, vol. 5, p. 15253, (2015).

ISSN: 2045-2322, doi: 10.1038/srep15253

Impact Factor	Citazioni
5.228	15

S12) Paola D'Angelo,* Valentina Migliorati, Francesco Sessa, Giordano Mancini, Ingmar Persson XANES reveals the flexible nature of hydrated Strontium in aqueous solution.

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. B, CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 120, p. 4114-4124, (2016).

ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/acs.jpccb.6b01054

Impact Factor	Citazioni
3.177	21

S13) Alessandra, Serva, Valentina, Migliorati, Riccardo Spezia, Riccardo, Paola D'angelo*

How Does Cell Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, vol. 23, p. 8424-8433, (2017).

ISSN: 0947-6539, doi: 10.1002/chem.201604889

Impact Factor	Citazioni
5.160	9

S14) Giorgio Olivo, Alessia Barbieri, Valeria Dantignana, Francesco Sessa, Valentina Migliorati, Manuel Monte, Sakura Pascarelli, Theyencheri Narayanan, Osvaldo Lanzalunga Stefano Di Stefao, Paola D'Angelo

Following a chemical reaction on the millisecond time scale by simultaneous X-ray and UV/Vis spectroscopy. THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, vol. 8, p. 2958-2963, (2017).

ISSN: 1948-7185, doi: 10.1021/acs.jpcllett.7b01133

Impact Factor	Citazioni
8.709	1

S15) Valentina Migliorati, Adriano Filippini, Andrea Di Cicco, Simone De Panfilis, Paola 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, vol. 56, p. 14013-14022, (2017).

ISSN: 0020-1669, doi: 10.1021/acs.inorgchem.7b02151

Impact Factor	Citazioni
---------------	-----------

Allegato F - Paola D'Angelo

Decreto Rettore Università di Roma "La Sapienza" n. 2800/2019 del 25/09/2019

Codice Concorso 2019POR031

4.700

4

S16) Giorgio Capocasa, Francesco Sessa, Francesco Tavani, Manuel Monte, Giorgio Olivo, Sakura Pascarelli, Osvaldo Lanzalunga, Stefano Di Stefano, Paola D'Angelo*

Coupled X-ray absorption/UV-vis monitoring of fast oxidation reactions involving a nonheme Iron-Oxo complex.

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 141, p. 2299-2304, (2019).

ISSN: 1520-5126, doi: 10.1021/jacs.8b08687

Impact Factor

14.695

Citazioni

2

Roma, 23 Ottobre 2019

Paola D'Angelo

