

Valentina Migliorati

Curriculum Vitae

Part I – General Information

Full Name	Valentina Migliorati
Spoken Languages	Italiano, Inglese

Part II – Education

Type	Year	Institution	Notes (Degree, Experience,...)
University graduation	2006	Università degli studi di Roma La Sapienza	Laurea in Chimica. Voto: 110/110 e lode. Titolo della tesi: <i>Studio strutturale e dinamico di soluzioni acquose di Hg(2+) e Cd(2+) attraverso metodi computazionali e spettroscopia di assorbimento dei raggi X.</i> Media degli esami: 29/30
PhD	2009	Università degli studi di Roma La Sapienza	Dottorato in Scienze Chimiche. Titolo della tesi: <i>A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration.</i>
Licensure 01	2014	---	Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1) conseguita il 1/12/2014.
Licensure 02	2017	---	Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato (seconda fascia) in Chimica Fisica (settore concorsuale 03/A2 - Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche) conseguita il 03/08/2017 .
Licensure 03	2018	---	Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1) conseguita il 07/08/2018.

Licensure 04	2018	---	Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Fondamenti Chimici delle Tecnologie (settore concorsuale 03/B2). Data conseguimento abilitazione: 25/10/2018.
--------------	------	-----	--

Part III – Appointments

IIIA – Academic Appointments

Start	End	Institution	Position
01/11/2006	31/10/2009	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Dottorando di ricerca in Scienze Chimiche
01/03/2010	28/02/2011	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2011	29/02/2012	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2012	28/02/2013	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2013	28/02/2014	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2014	28/02/2015	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2015	29/02/2016	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2016	28/02/2017	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2017	28/02/2018	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/03/2018	31/08/2019	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca (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).
01/12/2019	30/11/2020	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Assegnista di Ricerca – SSD CHIM/02
01/06/2021	----	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma “La Sapienza”	Posizione attuale: Ricercatore a tempo determinato di tipo A (RTDA) – SSD CHIM/02

Part IV – Teaching experience

Year	Institution	Lecture/Course
2006/ 2007	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2006/ 2007	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico-integrative, propedeutiche e di recupero
2007/ 2008	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2008/ 2009	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2009/ 2010	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2010/ 2011	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2011	Centro di editoria, orientamento e formazione universitaria CISU.	Didattica per la preparazione di esami universitari di Fisica
2011/ 2012	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2012/ 2013	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2013/ 2014	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2014/ 2015	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2015/ 2016	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2016/ 2017	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2017/ 2018	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica)
2012- 2018	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Assistenza nella Supervisione di tesi di Laurea magistrale e triennale in Chimica e nella supervisione di dottorandi di ricerca (in particolare di 2 dottorandi di ricerca, 5 lauree

		magistrali e 8 lauree triennali).
2019/ 2020	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Corso di dottorato "Metodi computazionali per lo studio di sistemi molecolari complessi" per gli studenti del corso di dottorato in Scienze Chimiche – 3 CFU
2020/ 2021	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica – 6 CFU
2021/ 2022	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica – 6 CFU
2020/ 2021 – 2021/ 2022	Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza"	Membro delle commissioni di laurea triennali e magistrali per il CAD in Chimica (L27 – LM54).

Part V - - Society memberships, Awards and Honors

Year	Title
2010	L'articolo " <i>Hydration Properties of the Bromide Aqua Ion: the Interplay of First Principle and Classical Molecular Dynamics, and X-ray Absorption Spectroscopy</i> ", (P. D'Angelo, V. Migliorati, L. Guidoni, Inorg. Chem. 2010, 49, 4224) 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.
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) 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.
2017	L'articolo "How Does CeIII 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.
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.

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

Year	Title	Program	Grant value
2010	Protic Ionic Liquids: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques	PROGETTI di RICERCA Sapienza Università di Roma-prot. C26A10H5T8 – Ruolo ricoperto: Partecipante	85.000 euro
2011	The structure of metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies	PROGETTI di RICERCA Sapienza Università di Roma-prot. C26A11SMBW - Ruolo ricoperto: Partecipante	80.000 euro
2012	The coordination chemistry of lanthanides and actinides in task specific ionic liquids: a combined experimental and theoretical investigation	PROGETTI di RICERCA Sapienza Università di Roma-prot. C26A129ZAY - Ruolo ricoperto: Partecipante	64.000 euro
2013	The coordination chemistry of lanthanides and actinides in complex liquids: a combined XAS and MD investigation	PROGETTI di RICERCA Sapienza Università di Roma-prot. C26A13K8AN - Ruolo ricoperto: Partecipante	3.000 euro
2013	The coordination chemistry of lanthanides and actinides in Ionic Liquids	Risorse computazionali ISCRA-CINECA- prot. HP10CCQEUQ -Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.	1070000 ore calcolo
2014	The role of metal ions in the prion conversion of different human prion protein variants	PROGETTI di RICERCA Sapienza Università di Roma-prot. C26A14L7CX- Ruolo ricoperto: Partecipante	50.000 euro
2015	Unraveling halide hydration: the interplay of Car-Parrinello Molecular Dynamics and EXAFS spectroscopy.	PROGETTI per avvio alla RICERCA Sapienza Università di Roma -prot. C26N159PNB. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.	3.000 euro
2015	Hydrogen Peroxide Activation by Non-Heme Iron Complexes: A Route for Sustainable and Selective Oxidation Processes.	PROGETTI di RICERCA Sapienza Università di Roma -prot. C26H159F5B. Ruolo ricoperto: Partecipante	30000 euro
2015	Structure and properties of geminal dicationic Ionic Liquids/water mixtures	Risorse computazionali ISCRA-CINECA- prot. HP10C2Q0F3 - Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.	1100000 ore calcolo
2016	Deep eutectic mixtures: a new generation of green solvents.	PROGETTI di RICERCA Sapienza Università di Roma - Ruolo ricoperto:	36600 euro

		Partecipante		
2017	Unraveling the peculiar properties of a new generation of green solvents: the deep eutectic solvents	Risorse computazionali ISCRA-CINECA - prot. HP10CZTDIS - Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.	2100000	ore calcolo
2018	Deep eutectic solvents: a combined theoretical and experimental study of the structural and dynamic properties	Risorse computazionali ISCRA-CINECA- grant HP10CGVY3L - Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.	400000	ore calcolo
2020	Unveiling the nanostructure of aqueous and methanol mixtures of Deep Eutectic Solvents	Risorse computazionali ISCRA-CINECA - grant HP10C7XQP3 - Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.	60000	ore calcolo

Part VII – Participation to post-lauream courses

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

Part VIII – Participation to Conferences and Workshops

Year	Title
2008	Partecipazione al “Terzo Convegno Giovani Chimici”. Presentazione di un poster dal titolo: “Zn ²⁺ ion hydration under pressure”. 18-19 Giugno 2008. Università “La Sapienza”. Roma.
2009	Partecipazione al “XXXIII Congresso Nazionale della società Chimica Italiana”. 5-10 Luglio 2009. Sorrento.
2009	Partecipazione alla “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.
2010	Partecipazione al “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.

2010	Partecipazione all' "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.
2010	Partecipazione al "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.
2012	Partecipazione al "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.
2014	Partecipazione al "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.
2015	Partecipazione al workshop: "Computer Simulations for Condensed Phase Systems: From Correlated Electrons to Novel Materials" 4-6 Maggio 2015. CNR. Roma.
2015	Partecipazione come 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.
2015	Partecipazione al "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.
2016	Partecipazione alla conferenza "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
2016	Partecipazione al Congresso "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.
2019	Partecipazione al Congresso "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.
2021	Partecipazione al Congresso "XXVII 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: from molecular solvents to Ionic Liquid based systems." 14-23 Settembre 2021. Evento online.

Keywords

Brief Description

Dinamica Molecolare
Calcoli ab-initio
Sviluppo di campi di forza
XAS
Sistemi disordinati

L'attività di ricerca è incentrata prevalentemente sullo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati attraverso approcci integrati innovativi, che combinano simulazioni di Dinamica Molecolare (DM) e diverse tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) e la diffrazione dei raggi X. Gli interessi scientifici abbracciano diversi campi della Chimica Fisica, come lo sviluppo di campi di forza classici attraverso calcoli ab initio, lo studio di soluzioni acquose di ioni metallici, lantanidi ed alogenuri mediante simulazioni di Dinamica Molecolare ab initio o classica in combinazione con i dati sperimentali XAS, lo studio di liquidi ionici puri e in miscele con acqua e l'indagine delle proprietà di solvatazione di ioni metallici in solventi organici ed in liquidi ionici. In particolare, si è dedicata allo studio di soluzioni acquose di ioni metallici attraverso una metodologia che combina la Dinamica Molecolare con la spettroscopia EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure). Data la difficoltà di ottenere informazioni accurate su sistemi disordinati utilizzando un singolo metodo di indagine, l'approccio EXAFS-DM si è rivelato essenziale per ottenere informazioni strutturali attendibili su questi sistemi. Inoltre ha perfezionato e applicato allo studio delle proprietà di idratazione di ioni un metodo di analisi dei dati XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) che permette di calcolare uno spettro XANES teorico, da confrontare con il dato sperimentale, come media configurazionale di un set di configurazioni estratte dalle simulazioni di Dinamica Molecolare. Tale procedura combinata XANES-DM ha fornito uno strumento prezioso per ottenere una descrizione tridimensionale accurata della geometria di coordinazione degli ioni metallici in soluzione acquosa. Ha applicato questi metodi di indagine anche allo studio di soluzioni acquose di ioni metallici in condizioni estreme di pressione (fino a 6.4 GPa) e allo studio dell'effetto degli ioni sulla struttura dell'acqua, argomento ampiamente dibattuto in letteratura negli ultimi decenni. Ha inoltre studiato le proprietà di idratazione di ioni alogenuro combinando la spettroscopia XAS con simulazioni di Dinamica Molecolare classica e di tipo Car-Parrinello. Ha esteso e applicato la procedura XANES-DM e EXAFS-DM allo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di ioni metallici in solventi organici. In questo ambito, ha anche sviluppato attraverso calcoli ab-initio dei potenziali di interazione ione-solvente da utilizzare nelle simulazioni, dimostrandone la validità attraverso il confronto con i dati sperimentali XAS. Ha inoltre sviluppato dei metodi innovativi di analisi delle simulazioni che le hanno permesso di identificare le geometrie di coordinazione di ioni metallici come lo ione Scandio(3+) o ioni alogenuro come lo ione bromuro. I metodi messi a punto possono essere utilizzati in futuro per determinare le geometrie di coordinazione di altri ioni in soluzione, geometrie che spesso risulta molto difficile identificare a causa della elevata mobilità delle molecole di solvente e del disordine intrinseco di questo tipo di sistemi. Si è inoltre dedicata allo studio di liquidi ionici puri, di miscele formate da acqua e liquidi ionici e della solvatazione di ioni metallici in liquidi ionici e recentemente di solventi ad eutettico profondo, sempre utilizzando simulazioni di Dinamica Molecolare e la spettroscopia XAS, o combinando la Dinamica Molecolare

con la tecnica sperimentale di diffrazione dei raggi X. Questi approcci integrati si sono rivelati essenziali per descrivere in modo accurato la complessa rete di interazioni presente in questi sistemi.

Part X– Participation to a research group

Year	Title
2006-.. .	Partecipazione a partire da Novembre 2006 al gruppo di Ricerca XAMD inizialmente in qualità di Dottorando, successivamente come Assegnista di Ricerca, e attualmente come RTD-A presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza" coordinato dalla Prof.ssa Paola D'Angelo. Il gruppo di ricerca é caratterizzato da numerose collaborazioni nazionali ed internazionali. Queste collaborazioni hanno permesso la pubblicazione di numerosi articoli in collaborazione. Inoltre il gruppo ha ottenuto diversi progetti di Ateneo, ai quali ho preso parte come partecipante o come responsabile scientifico, che sono stati finanziati dall'Università di Roma "La Sapienza".

Part XI– Principal collaborations

Prof. Ingmar Persson, Department of Chemistry and Biotechnology, Swedish University of Agricultural Sciences, Uppsala, Svezia. Studio delle proprietà di coordinazione di ioni Lantanidi trivalenti e di ioni metallici in soluzione acquosa, in solventi organici e in solidi cristallini.
Prof. Riccardo Spezia, Magali Duvail, Prof. Pierre Vitorge, Laboratoire Analyse et Modelisation Pour la Biologie et L'Environnement, Evry University, France. Determinazione di un nuovo set di raggi ionici per tutta la serie di ioni Lantanidi trivalenti in soluzione acquosa.
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". Studio delle proprietà di idratazione di ioni metallici in acqua in condizioni estreme di temperatura e pressione (a partire da condizioni ambiente fino a circa 6.4 GPa).
Giuliana Aquilanti, Sincrotrone Elettra di Trieste e Sakura Pascarelli, Sincrotrone ESRF di Grenoble. Studio delle proprietà strutturali e dinamiche di liquidi ionici.
Prof. Leonardo Guidoni, Dipartimento di Chimica, Ingegneria Chimica e dei materiali, Università degli studi dell'Aquila. Proprietà di idratazione di ioni alogenuro attraverso simulazioni di Dinamica Molecolare di tipo Car-Parrinello.
Prof. Vincenzo Barone, attualmente Direttore della Scuola Normale Superiore di Pisa. Studio delle proprietà di coordinazione dello ione Hg(2+) in acqua combinando simulazioni di Dinamica Molecolare, spettroscopia EXAFS e spettroscopia XANES.

Part XII - Peer Reviewing and Editorial activities

Year	Title
2012- ancora in corso	Svolge attività come Referee per diverse riviste scientifiche internazionali dell'American Chemical Society, dell'American Institute of Physics, di Elsevier e della Royal Society of Chemistry, tra le quali: Inorganic Chemistry, Journal of Physical Chemistry, Journal of Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Molecular Liquids, Catalysis Science & Technology, Nanoscale e Journal of

Chemical Information and Modeling.

2021

Ha svolto attività editoriale per la rivista scientifica internazionale "Materials" pubblicata da MDPI.

Part XI– Summary of Scientific Achievements

Product type	Number	Data Base	Start	End
Papers [international]	59	Scopus	2008	2021
Books [scientific]	2	2 capitoli in 2 libri (ISBN: 9789533076348, ISBN: 9783319016986)	2011	2014

Total Impact factor	220.809
Total Citations	1548
Average Citations per Product	26.24
Hirsch (H) index	28
Normalized H index*	1.87

*H index divided by the academic age (time span from first publication - 2008->2022)

Part XII – Selected Publications

(List of publications selected for the evaluation)

*Nota: *l'asterisco vicino al nome indica le pubblicazioni delle quali sono Corresponding Author. Gli impact factor delle riviste sono quelli calcolati in relazione all'anno della pubblicazione (per il 2021 è stato utilizzato quello relativo al 2020)*

1) **V. Migliorati***, G. Fazio, S. Pollastri, A. Gentili, P. Tomai, F. Tavani, P. D'Angelo.
Solubilization properties and structural characterization of dissociated HgO and HgCl₂ in deep eutectic solvents

JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, **329**, 115505 (2021).

journal IF: 6.165

citazioni: 4

2) **V. Migliorati***, A. Gibiino, A. Lapi, M. Busato, P. D'Angelo.

On the Coordination Chemistry of the lanthanum(III) Nitrate Salt in EAN/MeOH Mixtures

INORGANIC CHEMISTRY 2021, **60**, 10674–10685 (2021).

journal IF:5.165

citazioni: 0

3) **V. Migliorati***, A. Lapi, Paola D'Angelo.

Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(III) bistriflimide salt in ionic liquid/acetonitrile mixtures

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, **22**, 20434-20443 (2020).

journal IF:3.676

citazioni: 3

4) **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: 3.430

citazioni: 5

5) **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: 6

6) 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: 19

7) **V. Migliorati***, A. Serva, F. Sessa, A. Lapi, P. D'Angelo.

Influence of Counterions on the Hydration Structure of Lanthanide Ions in Dilute Aqueous Solutions

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **122**, 2779–2791 (2018).

journal IF: 2.923

citazioni: 21

8) **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: 7

9) **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: 36

10) A. Serva, **V. Migliorati**, R. Spezia, P. D'Angelo.

How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study.

CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, **23**, 8424-8433 (2017).

journal IF:5.160

citazioni: 16

11) **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: 22

- 12) 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: 29
- 13) 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: 20
- 14) **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: 33
- 15) **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: 30
- 16) **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: 43
- 17) **V. Migliorati***, P. D'Angelo.
A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg²⁺ ion solvation properties in methanol solution
RSC ADVANCES, **3**, 21118-21126 (2013).
journal IF: 3.708
citazioni: 20
- 18) **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: 40
- 19) **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: 48
- 20) 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: 45

Part XIII – Other Publications

21) **V. Migliorati***, P. D'Angelo.

Deep eutectic solvents: A structural point of view on the role of the anion
CHEMICAL PHYSICS LETTERS, **777**, 138702 (2021).

journal IF: 2.328

citazioni: 2

22) M. Busato, V. Di Lisio, A. Del Giudice, P. Tomai, **V. Migliorati**, L. Galantini, A. Gentili, A. Martinelli, P. D'Angelo.

Transition from molecular- to nano-scale segregation in a deep eutectic solvent - water mixture
JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, **331**, 115747 (2021).

journal IF:6.165

citazioni: 4

23) M. Busato, **V. Migliorati**, A. Del Giudice, V. Di Lisio, P. Tomai, A. Gentili, P. D'Angelo.

Anatomy of a deep eutectic solvent: structural properties of choline chloride:sesamol 1:3 compared to reline
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, **23**, 11746–11754 (2021).

journal IF:3.676

citazioni: 2

24) M. Busato, A. Del Giudice, V. Di Lisio, P. Tomai, **V. Migliorati**, A. Gentili, A. Martinelli, P. D'Angelo.
Fate of a Deep Eutectic Solvent upon Cosolvent Addition: Choline Chloride-Sesamol 1:3 Mixtures with Methanol

ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY AND ENGINEERING **9**, 12252–12261 (2021).

journal IF: 8.198

citazioni: 0

25) M. Busato, A. Melchior, **V. Migliorati**, A. Colella, I. Persson, G. Mancini, D. Veclani, P. D'Angelo.

Elusive Coordination of the Ag⁺ Ion in Aqueous Solution: Evidence for a Linear Structure.
INORGANIC CHEMISTRY, **59**, 17291–17302 (2020).

journal IF: 5.165

citazioni: 4

26) **V. Migliorati***, F. Sessa, P. D'Angelo.

Deep eutectic solvents: A structural point of view on the role of the cation
CHEMICAL PHYSICS LETTERS: X, **2**,100001 (2019).

citazioni: 30

27) F. Sessa, **V. Migliorati**, A. Lapi, P. D'Angelo.

Ce³⁺ and La³⁺ ions in ethylammonium nitrate: A XANES and molecular dynamics investigation
CHEMICAL PHYSICS LETTERS **706**, 311-316 (2018).

journal IF: 1.901

citazioni: 5

28) F. Sessa, P. D'Angelo, **V. Migliorati***.

Combined distribution functions: A powerful tool to identify cation coordination geometries in liquid systems

CHEMICAL PHYSICS LETTERS, **691**, 437-443 (2018).

journal IF: 1.901

citazioni: 12

29) G. Olivo, A. Barbieri, V. Dantignana, F. Sessa, **V. Migliorati**, M. Monte, S. Pascarelli, T. Narayanan, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, P. D'Angelo.

Following a chemical reaction on the millisecond time scale by simultaneous X-ray and UV/Vis spectroscopy

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, **8**, 2958-2963 (2017).

journal IF: 8.709

citazioni: 8

30) R. Spezia, **V. Migliorati**, P. D'Angelo.

On the development of polarizable and Lennard-Jones force fields to study hydration structure and dynamics of actinide(III) ions based on effective ionic radii

JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, **147**, 161707 (2017).

journal IF: 2.843

citazioni: 21

31) P. D'Angelo, **V. Migliorati**, F. Sessa, G. Mancini, I. Persson.

XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **120**, 4114-4124 (2016).

journal IF: 3.177

citazioni: 41

32) A. Serva, **V. Migliorati**, A. Lapi, P. D'Angelo.

Unveiling the complex network of interactions in Ionic Liquids: A combined EXAFS and Molecular Dynamics approach

JOURNAL OF PHYSICS. CONFERENCE SERIES, **712**, 012135 (2016).

citazioni: 0

33) P. D'Angelo, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, **V. Migliorati**.

Structural Properties and Aggregation Behaviour of 1-Hexyl-3-methylimidazolium Iodide in Aqueous Solutions

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **119**, 14515-14526 (2015).

journal IF: 3.187

citazioni: 32

34) G. Giachin, P. Thao Mai, T. Hoa Tran, G. Salzano, F. Benetti, **V. Migliorati**, A. Arcovito, S. Della Longa, G. Mancini, P. D'Angelo, G. Legname.

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

SCIENTIFIC REPORTS **5**, 15253 (2015).

journal IF: 5.228

citazioni: 25

35) P. D'Angelo, **V. Migliorati**.

Solvation structure of Zn²⁺ and Cu²⁺ ions in acetonitrile: A combined EXAFS and XANES study

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **119**, 4061-4067 (2015).

journal IF: 3.187

citazioni: 37

36) **V. Migliorati***, P.D'Angelo.

Unraveling the perturbation induced by Zn²⁺ and Hg²⁺ ions on the hydrogen bond patterns of liquid methanol

CHEMICAL PHYSICS LETTER, **633**, 70-75 (2015).

journal IF: 1.860

citazioni: 4

37) P. D'Angelo, **V. Migliorati**, I. Persson, G. Mancini, S. 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, **53**, 9778-9784 (2014).

journal IF: 4.762

citazioni: 8

38) A. Zitolo, **V. Migliorati**, G. Aquilanti, P. D'Angelo.

On the possibility of using XANES to investigate bromide-based ionic liquids

CHEMICAL PHYSICS LETTERS, **591**, 32-36 (2014).

journal IF: 1.897

citazioni: 12

39) P. D'Angelo, **V. Migliorati**, R. Spezia, S. De Panfilis, I. Persson, A. Zitolo.

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

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

journal IF: 4.198

citazioni: 14

40) **V. Migliorati***, M. Mancini, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, P. D'Angelo.

Hydration properties of the Zn²⁺ ion in water at high pressure

INORGANIC CHEMISTRY, **52**, 1141-1150 (2013).

journal IF: 4.794

citazioni: 36

41) **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: 28

42) L. Gontrani, E. Bodo, A. Triolo, F. Leonelli, P. D'Angelo, **V. Migliorati**, R. Caminiti.

The interpretation of diffraction patterns of two prototypical protic ionic liquids: A challenging task for classical molecular dynamics simulations

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **116**, 13024-13032 (2012).

journal IF: 3.607

citazioni: 54

43) G. Chillemi, S. De Santis, M. Falconi, G. Mancini, **V. Migliorati**, A. Battistoni, F. Pacello, A. Desideri, P. D'Angelo.

Carbon monoxide binding to the heme group at the dimeric interface modulates structure and copper

accessibility in the Cu,Zn superoxide dismutase from Haemophilus ducreyi: In silico and in vitro evidences

JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE AND DYNAMICS, **30**, 269-279 (2012).

citazioni: 4

- 44) **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: 35
- 45) **V. Migliorati***, G. Chillemi, P. D'Angelo.
On the Solvation of the Zn²⁺ Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach
INORGANIC CHEMISTRY, **50**, 8509-8515 (2011).
journal IF: 4.601
citazioni: 33
- 46) **V. Migliorati***, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo.
Effect of the Zn²⁺ and Hg²⁺ Ions on the Structure of Liquid Water
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, **115**, 4798-4803 (2011).
journal IF: 2.946
citazioni: 33
- 47) **V. Migliorati**, P. Ballirano, L. Gontrani, O. Russina, R. Caminiti.
Crystal polymorphism of propylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **115**, 11805-11815 (2011).
journal IF: 3.696
citazioni: 15
- 48) **V. Migliorati**, P. Ballirano, L. Gontrani, A. Triolo, R. Caminiti.
Thermal and structural properties of ethylammonium chloride and its mixture with water
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **115**, 4887-4899 (2011).
journal IF: 3.696
citazioni: 29
- 49) P. D'Angelo, A. Zitolo, **V. Migliorati**, G. Chillemi, M. Duvail, P. Vitorge, S. Abadie, R. Spezia.
Revised Ionic Radii of Lanthanoid(III) Ions in Aqueous Solution
INORGANIC CHEMISTRY, **50**, 4572-4579 (2011).
journal IF: 4.601
citazioni: 159
- 50) P. D'Angelo, A. Zitolo, **V. Migliorati**, E. Bodo, G. Aquilanti, J. L. Hazemann, D. Testemale, G. Mancini, R. Caminiti.
X-Ray absorption spectroscopy investigation of 1-alkyl-3-methylimidazolium bromide salts
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, **135**, 07545 (2011).
journal IF: 3.333
citazioni: 29
- 51) P. D'Angelo, **V. Migliorati** and L. Guidoni.
Hydration Properties of the Bromide Aqua Ion: the Interplay of First Principle and Classical Molecular Dynamics, and X-ray Absorption Spectroscopy.
INORGANIC CHEMISTRY, **49**, 4224-4231 (2010).
journal IF: 4.326
citazioni: 69

- 52) P. D'Angelo, A. Zitolo, **V. Migliorati** and I. Persson.
Analysis of the Detailed Configuration of Hydrated Lanthanoid(III) Ions in Aqueous Solution and Crystalline Salts by Using K- and L₃-Edge XANES Spectroscopy.
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, **16**, 684-692 (2010).
journal IF: 5.476
citazioni: 65
- 53) **V. Migliorati***, G. Chillemi, G. Mancini, A. Zitolo, S. Tatoli, A. Filipponi and P. D'Angelo.
Ion hydration in high-density water.
JOURNAL OF PHYSICS. CONFERENCE SERIES, **190**, 012057 (2009).
citazioni: 12
- 54) P. D'Angelo, A. Zitolo, **V. Migliorati**, G. Mancini, I. Persson, G. Chillemi.
Structural Investigation of Lanthanoid Coordination: a Combined XANES and Molecular Dynamics Study.
INORGANIC CHEMISTRY, **48**, 10239-10248 (2009).
journal IF: 4.657
citazioni: 48
- 55) P. D'Angelo, **V. Migliorati**, G. Mancini, V. Barone and G. Chillemi.
Integrated experimental and theoretical approach for the structural characterization of Hg²⁺ aqueous solutions.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, **128**, 084502 (2008).
journal IF: 3.149
citazioni: 46
- 56) G. Mancini, N. Sanna, V. Barone, **V. Migliorati**, P. D'Angelo and G. Chillemi.
Structural and Dynamical Properties of the Hg²⁺ Aqua Ion: A Molecular Dynamics Study.
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, **112**, 4694-4702 (2008).
journal IF: 4.189
citazioni: 44
- 57) P. D'Angelo, **V. Migliorati**, G. Mancini and G. Chillemi.
A Coupled Molecular Dynamics and XANES Data Analysis Investigation of Aqueous Cadmium(II)
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, **112**, 11833-11841 (2008).
journal IF: 2.871
citazioni: 47
- 58) P. D'Angelo, A. Zitolo, **V. Migliorati** and N. V. Pavel.
Measurement of X-ray multielectron photoexcitations at the I K edge.
PHYSICAL REVIEW B, **78**, 144105-144105 (2008).
journal IF: 3.322
citazioni: 7
- 59) P. D'Angelo, A. Lapi, **V. Migliorati**, A. Arcovito, M. Benfatto, O.M. Roscioni, W. Mayer- Klaucke and S. Della Longa.
X-ray Absorption Spectroscopy of hemes and hemeproteins in solution: multiple scattering analysis
INORGANIC CHEMISTRY, **47**, 9905-9918 (2008).
journal IF: 4.147
citazioni: 47