



PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCORSALE 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.R. N. 1900/2016 DEL 03.08.2016.

(Codice Concorso 2016RTDB010, pubblicato sulla Gazzetta Ufficiale – IV serie speciale n. 64 del 12.08.2016)

Relazione finale

A seguito della nomina di cui al Decreto Rettorale n. n. 2334/2016 del 27.09.2016, i sottoscritti commissari della selezione citata in epigrafe:

Prof. Eugenio CAPONETTI – Professore Ordinario – Università di Palermo - componente;

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU - professore Ordinario – Università di Cagliari – segretario;

Prof. Nicolae Viorel PAVEL – Professore Ordinario – Sapienza Università di Roma - presidente

si riuniscono per la seduta dedicata alla stesura della **Relazione Finale**, in Roma, nei locali del Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza", in data 15 Dicembre alle ore 19.00.

La Commissione ha tenuto complessivamente n. 5 riunioni, iniziando i lavori il giorno 11 Novembre 2016 e concludendoli il giorno 15 Dicembre 2016.

Nella prima riunione (11 Novembre 2016) la Commissione ha proceduto a stilare i criteri (Verbale 1).

Nella seconda riunione (21 Novembre 2016) ha proceduto alla verifica dei titoli e delle pubblicazioni e a convocare i quattro candidati per il colloquio (Verbale 2).

Nella terza riunione (14 Dicembre 2016) ha proceduto a alla valutazione dei titoli e delle pubblicazioni (Verbale 3).

Nella quarta riunione (15 Dicembre 2016) ha proceduto al colloquio (Verbale 4).

Nella quinta riunione (15 Dicembre 2016) ha proceduto a formulare i giudizi comparativi complessivi sui candidati che hanno sostenuto il colloquio (Verbale 5).

Al termine della procedura concorsuale, la Commissione ha indicato, all'unanimità, la Dott. Olga Russina selezionata per il prosieguo della procedura selettiva.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 19:30 del 15 Dicembre 2016.

Il Presidente della presente Commissione si impegna a consegnare al Responsabile del procedimento (vedi **Allegato H**):

- una copia originale di tutti i verbali delle singole riunioni con allegati i giudizi formulati;
- una copia originale dei giudizi collegiali complessivi comparativi espressi su ciascun candidato;
- una copia originale della relazione riassuntiva dei lavori svolti.
- Tutto il materiale sopra indicato viene sistemato in un plico chiuso e firmato da tutti i componenti la Commissione sui lembi di chiusura.

La Commissione viene sciolta alle ore 19:50

Letto, approvato e sottoscritto.

Prof. Nicolae Viorel PAVEL presidente

Prof. Eugenio CAPONETTI membro

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU segretario

Università degli Studi di Roma "La Sapienza"

CF 80209930587 PI 02133771002

Dipartimento di Chimica

P.le Aldo Moro n. 5, 00185 Roma

T (+39) 06 49913529 F (+39) 06 490631

www.uniroma1.it



PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B 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.R. N. 1900/2016 DEL 03.08.2016.

(Codice Concorso 2016RTDB010, pubblicato sulla Gazzetta Ufficiale – IV serie speciale n. 64 del 12.08.2016)

Allegato B al Verbale 2

TITOLI E PUBBLICAZIONI VALUTABILI

Candidati:

- 1)Lorenzo GONTRANI
- 2)Larisa Lvova
- 3)Olga Russina
- 4)Francesco Sebastianelli

Candidato Lorenzo Gontrani

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

- 1)Maturità scientifica (1992) Liceo Scientifico "A. Righi", Roma.
- 2)**Diploma Laurea** Laurea in Chimica (1998), Sapienza Università di Roma e allegata lista degli esami sostenuti.
- 3)**Dottorato** di Ricerca in Scienze Chimiche, (2002), Università di Pisa.
- 4)**Abilitazione** scientifica nazionale
Abilitato a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche)
- 5)**Altro titolo** di studio: Cambridge First Certificate in English, conseguito a giugno 1990, presso The British Institute - Roma
- 6)**Contratti di ricerca** presso università in Italia a tempo determinato, assegni di ricerca e borse postdottorato
Assegni di ricerca (**6 anni**):
 - a)assegno di ricerca presso Università degli Studi di CAGLIARI, dipartimento di Scienze Chimiche, dal 16/11/2007 al 15/11/2008;
 - b)assegno di ricerca presso Università degli Studi di ROMA "La Sapienza", dipartimento di Scienze della Terra, dal 01/07/2009 al 30/06/2010;
 - c)assegno di ricerca presso Università degli Studi di ROMA "La Sapienza", dipartimento di Chimica, dal 01/05/2014 al 30/04/2015;
 - d)assegno di ricerca presso Università degli Studi di ROMA "La Sapienza", dipartimento di Chimica, dal 01/02/2016 al 31/01/2017;
 - e)Collaboratore di ricerca (FIRB) National Research Council, Structure of Matter Department dal 01/05/2011 al 30/04/2014
 - f)Ricercatore - Colosseum Combinatorial Centre for Technology (Rome) – Biotech MIUR startup dal 01/10/2002 al 31/05/2006
 - g)Borsa presso Italian Supercomputing Centre (CASPUR) dal 01/06/2006 al 15/11/2007
- 7) **Riconoscimenti scientifici**: Coeditor di un libro: The Structure of Ionic Liquids Soft and Biological Matter, Springer International Publishing, 2014
- 8)**Attività di Formazione** - Partecipazioni a scuole nazionali e internazionali
1998 Gaussian Workshop CASPUR
1999 Scuola di Calcolo Parallelo CINECA
2004 Corso sulla privacy (Legge 675/1996) CONSIPA
2005 Scuola estiva di calcolo avanzato CASPUR



- 2005 L'impatto della Bioinformatica sulle scienze biomediche IDI
- 2007 Message-Passing Programming with MPI EPCC (Edinburgh, UK)
- 2007 6th workshop on molecular theories and simulations, Gaeta, Sapienza University
- 2009 Ionic Liquid force field parametrization in Prof. A. H. Padua group Blaise Pascal University (Clermont-Ferrand, FR)
- 2010 Advances in the Implementation of Polarizable Force Fields for Molecular Simulations CECAM (Lausanne, CH)
- 2013 Analysis of Diffraction Data in Real Space ILL&ESRF (Grenoble, FR)
- 2016 Introduction to Marconi HPC Cluster for users and developers CNR/CINECA
- 9) **Partecipazioni a Congressi nazionali ed internazionali** – Oral o poster nel periodo 2006-2016
- 1) 2016 - ISXB2, Second International Symposium on Halogen Bonding, Göteborg (Sweden); *X-Rays Diffraction and Molecular Dynamics Reveal Halogen Bond in Liquid Acetonitriles*
 - 2) 2015 - 3rd DCTC Congress, Roma (Italy); *Prediction of Infrared Spectra of Ionic Liquids with ab initio Molecular Dynamics*
 - 3) 2015 - 3rd DCTC Congress, Roma (Italy); Poster: *"Halogen Bond" in Liquid Acetonitriles: the First X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics Study* (coautore)
 - 4) 2015 -THEOBIO 2015, Cagliari (Italy); *Biocompatible Ionic Liquids: quantum and classical simulation of static and dynamic properties*
 - 5) 2014 - Winter Modeling, Modena (Italy); *Prepeak in Protic Ionic Liquids: Do classical and QM Simulations reproduce this Medium-Range Order Phenomenon?*
 - 6) 2013 - Analysis of diffraction data in real space. Grenoble (France); Poster: *Short and medium-range Order in L-Proline Esters Ionic Liquids: A X-Ray and MD Study*
 - 7) 2011 - Analysis of diffraction data in real space. Grenoble (France), *Short/Medium-to-Long Range Order correlations in Room Temperature Ionic Liquids.* (coautore)
 - 8) 2011 - 4-th Conference on Ionic liquids, Washington (USA), *Morphology of Poly(Ethylene Oxide)-RTILs Mixtures: Saxes and MD Studies* (coautore)
 - 9) 2011 - Workshop su Fisica della Materia e Scienza dei Materiali Computazionali al DMD, Rome (Italy), *Experimental and Computational investigation of room temperature ionic liquids and their binary mixtures* (coautore)
 - 10) 2011 - 110th Annual German Conference on Physical Chemistry, Berlin (Germany), *On the nature of nm-scale heterogeneities in ionic liquids* (coautore)
 - 11) 2010 - International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2, Rome (Italy); *Anion conformational patterns and bulk properties in bis(perfluoroalkylsulfonyl)imide -based ionic liquids studied with X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics simulations*
 - 12) 2010 - International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2, Rome (Italy), *A Combined Molecular Dynamics AND X-Ray Diffraction Study of Protic Ionic Liquid/Water Mixtures* (coautore)
 - 13) 2010 - International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2, Rome (Italy) *Atomistic simulations of Imidazolium-based Ionic Liquids: current challenges for theoretical models* (coautore)
 - 14) 2010 - Winter Modeling, SNS Pisa (Italy) Poster *Intermolecular Interactions in Protic Ionic Liquids: An X-Ray/Neutron Scattering and Molecular Simulation Study of EAN and PAN*
 - 15) 2009 - EMLG-JMLG Annual Meeting 2009, Intermolecular Interactions and Liquid Structure, Salzburg, (Austria) Poster: *An Energy Dispersive study of liquid dimethyl carbonate*
 - 16) 2008 - Conference on Molten Salts and Ionic Liquids, Copenhagen (Denmark) *Morphology and Relaxation processes in a RTIL: the case of [C6mim][Tf2N]* (coautore)
 - 17) 2008 - TUMA 2008 (L'Aquila, Italy)Poster: *Pure and Solvated Azoles: a Combined Theoretical and X-Ray Diffraction Study of 1,2,3 Triazole*
 - 18) 2006 - VI Convegno Nazionale Gruppo Interdivisionale Chimica Computazionale (GICC) Isola di San Servolo, Venezia. Poster: *A Quantum-Mechanical Study of the Anticancer Drugs Camptothecin and Topotecan.*
- 10)**Organizzazione** di Grants per Attività Progettuale
- a)come investigatore principale



2009-2012 Caspur grants: tempo di calcolo per 4 progetti su liquidi ionici.

b) come investigatore partecipante

2002 Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa”

MURST (now MIUR), N° Art 11 Legge 451/94 presso C4T, biotech

2010, 2011, 2013, 2014 Ateneo Università di Roma, Progetti annuali

PRIN 2009, "Struttura e dinamica di liquidi ionici e loro miscele”

2011-2014 FIRB project : Structure and dynamics of ionic liquids

2013-2014 Tre progetti che riguardano lo studio di liquidi ionici e affini e loro applicazioni

11) Attività didattica

2002 MIUR - Training Courses, N° Art 11 Legge 451/94

Corso: Computational Chemistry and “automated docking – virtual screening” methods.

Lezioni teoriche e pratiche

2011, 2012, 2013, 2014, 2015

Corso di Computational Chemistry/Physical Chemistry III (X-Ray Diffraction).

Lezioni teoriche e pratiche

Dipartimento di Chimica – Università La Sapienza

12) Altro.

Cinque lettere di presentazione: Proff.ri A. H. Padua, F. Ramondo, F. Mocci, I. Tommasi, N. Sanna, O. Incani

La Commissione all'unanimità dichiara i titoli sopraelencati come **valutabili**.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI –

Il candidato presenta 30 pubblicazioni, come da elenco, corredate da alcuni indicatori bibliometrici.

30) Campetella, M.; Bovi, D.; Caminiti, R.; Guidoni, L.; Bencivenni, L.; Gontrani, L., *Structural and vibrational study of 2-MethoxyEthylAmmonium nitrate (2-OMeEAN): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics*, Journal of Chemical Physics, 2016, 145, 024507

29) Mariani, A.; Caminiti, R.; Campetella, M.; Gontrani, L., *Pressure-induced mesoscopic disorder in protic ionic liquids: first computational study*, Physical Chemistry Chemical Physics 2016, 18 (4), 2297-2302

28) Salma, U.; Ballirano, P.; Usula, M.; Caminiti, R.; Plechkova, N. V.; Seddon, K. R.; Gontrani, L., *A new insight into the nanostructure of alkylammonium alkanoates based ionic liquids in water*, Physical Chemistry Chemical Physics 2016, 18 (16), 11497-11502

27) Tanzi, L.; Nardone, M.; Benassi, P.; Ramondo, F.; Caminiti, R.; Gontrani, L., *Choline salicylate ionic liquid by X-ray scattering, vibrational spectroscopy and molecular dynamics*, Journal of Molecular Liquids 2016, 218, 39-49

26) Campetella, M.; Bodo, E.; Caminiti, R.; Martino, A.; D'Apuzzo, F.; Lupi, S.; Gontrani, L., *Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions*, Journal of Chemical Physics 2015, 142, 234502

25) De Santis, S.; Masci, G.; Casciotta, F.; Caminiti, R.; Scarpellini, E.; Campetella, M.; Gontrani, L., *Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physico-chemical characterization*, Physical Chemistry Chemical Physics 2015, 17 (32), 20687-20698

24) Campetella, M.; Gontrani, L.; Leonelli, F.; Bencivenni, L.; Caminiti, R., *Two Different Models to Predict Ionic-Liquid Diffraction Patterns: Fixed-Charge versus Polarizable Potentials* Chemphyschem 2015, 16 (1), 197-203

23) Campetella, M.; De Santis, S.; Caminiti, R.; Ballirano, P.; Sadun, C.; Tanzi, L.; Gontrani, L., *Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?*, Rsc Advances 2015, 5 (63), 50938-50941

22) Bodo, E.; Mangialardo, S.; Capitani, F.; Gontrani, L.; Leonelli, F.; Postorino, P., *Interaction of a long alkyl chain protic ionic liquid and water*, Journal of Chemical Physics 2014, 140, 204503



- 21) Benedetto, A.; Bodo, E.; Gontrani, L.; Ballone, P.; Caminiti, R., *Amino Acid Anions in Organic Ionic Compounds. An ab Initio Study of Selected Ion Pairs*, Journal of Physical Chemistry B 2014, 118 (9), 2471-2486
- 20) Campetella, M.; Gontrani, L.; Bodo, E.; Ceccacci, F.; Cesare Marincola, F.; Caminiti, R., *Conformational isomerisms and nano-aggregation in substituted alkylammonium nitrates ionic liquids: An x-ray and computational study of 2-methoxyethylammonium nitrate*, Journal of Chemical Physics 2013, 138, 184506
- 19) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Materazzi, S.; Ceccacci, F.; Caminiti, R., *A Combined Theoretical and Experimental Study of Solid Octyl and Decylammonium Chlorides and of Their Aqueous Solutions*, Journal of Physical Chemistry B 2013, 117 (25), 7806-7818
- 18) Russina, O.; Triolo, A.; Gontrani, L.; Caminiti, R., *Mesosopic Structural Heterogeneities in Room-Temperature Ionic Liquids*, Journal of Physical Chemistry Letters 2012, 3 (1), 27-33
- 17) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Caminiti, R., *Crystal Polymorphism of Hexylammonium Chloride and Structural Properties of Its Mixtures with Water*, Journal of Physical Chemistry B 2012, 116 (7), 2104-2113
- 16) Gontrani, L.; Bodo, E.; Triolo, A.; Leonelli, F.; D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Caminiti, R., *The Interpretation of Diffraction Patterns of Two Prototypical Protic Ionic Liquids: a Challenging Task for Classical Molecular Dynamics Simulations*, Journal of Physical Chemistry B 2012, 116 (43), 13024-13032
- 15) Cesare Marincola, F.; Piras, C.; Russina, O.; Gontrani, L.; Saba, G.; Lai, A., *NMR Investigation of Imidazolium-Based Ionic Liquids and Their Aqueous Mixtures*, Chemphyschem 2012, 13 (5), 1339-1346
- 14) Gontrani, L.; Caminiti, R., *The structure of liquid N-methyl pyrrolidone probed by x-ray scattering and molecular simulations*, Journal of Chemical Physics 2012, 136, 074505
- 13) Macchiagodena, M.; Ramondo, F.; Triolo, A.; Gontrani, L.; Caminiti, R., *Liquid Structure of 1-Ethyl-3-methylimidazolium Alkyl Sulfates by X-ray Scattering and Molecular Dynamics*, Journal of Physical Chemistry B 2012, 116 (45), 13448-13458
- 12) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Russina, O.; Caminiti, R., *Crystal Polymorphism of Propylammonium Chloride and Structural Properties of Its Mixture with Water*, Journal of Physical Chemistry B 2011, 115 (41), 11805-11815
- 11) Macchiagodena, M.; Gontrani, L.; Ramondo, F.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Liquid structure of 1-alkyl-3-methylimidazolium-hexafluorophosphates by wide angle x-ray and neutron scattering and molecular dynamics*, Journal of Chemical Physics 2011, 134 (11) 114521
- 10) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Thermal and Structural Properties of Ethylammonium Chloride and Its Mixture with Water*, Journal of Physical Chemistry B 2011, 115 (17), 4887-4899
- 9) Bodo, E.; Gontrani, L.; Caminiti, R.; Plechkova, N. V.; Seddon, K. R.; Triolo, A., *Structural Properties of 1-Alkyl-3-methylimidazolium Bis{(trifluoromethyl)sulfonyl}amide Ionic Liquids: X-ray Diffraction Data and Molecular Dynamics Simulations*, Journal of Physical Chemistry B 2010, 114 (49), 16398-16407
- 8) Bodo, E.; Gontrani, L.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Structural Determination of Ionic Liquids with Theoretical Methods: C(8)mimBr and C(8)mimCl. Strength and Weakness of Current Force Fields*, Journal of Physical Chemistry Letters 2010, 1 (7), 1095-1100
- 7) Russina, O.; Gontrani, L.; Fazio, B.; Lombardo, D.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Selected chemical-physical properties and structural heterogeneities in 1-ethyl-3-methylimidazolium alkyl-sulfate room temperature ionic liquids*, Chemical Physics Letters 2010, 493 (4-6), 259-262
- 6) Russina, O.; Triolo, A.; Gontrani, L.; Caminiti, R.; Xiao, D.; Hines, L. G., Jr.; Bartsch, R. A.; Quitevis, E. L.; Plechkova, N.; Seddon, K. R., *Morphology and intermolecular dynamics of 1-alkyl-3-methylimidazolium bis{(trifluoromethane)sulfonyl}amide ionic liquids: structural and dynamic evidence of nanoscale segregation*, Journal of Physics-Condensed Matter 2009, 21 (42) 424121



- 5) Gontrani, L.; Russina, O.; Lo Celso, F.; Caminiti, R.; Annat, G.; Triolo, A., *Liquid Structure of Trihexyltetradecylphosphonium Chloride at Ambient Temperature: An X-ray Scattering and Simulation Study*, Journal of Physical Chemistry B 2009, 113 (27), 9235-9240
- 4) Gontrani, L.; Russina, O.; Cesare Marincola, F.; Caminiti, R., *An energy dispersive x-ray scattering and molecular dynamics study of liquid dimethyl carbonate*, Journal of Chemical Physics 2009, 131, 244503
- 3) Gontrani, L.; Ramondo, F.; Caracciolo, G.; Caminiti, R., *A study of cyclohexane, piperidine and morpholine with X-ray diffraction and molecular simulations*, Journal of Molecular Liquids 2008, 139 (1-3), 23-28
- 2) Gontrani, L.; Ramondo, F.; Caminiti, R., *Energy dispersive X-ray diffraction and molecular dynamics meet: the structure of liquid pyrrole*, Chemical Physics Letters 2006, 417 (1-3), 200-205
- 1) Gontrani, L.; Caminiti, R.; Bencivenni, L.; Sadun, C., *Molecular aggregation phenomena in solution: an energy dispersive X-ray diffraction study of concentrated imidazole water solutions*, Chemical Physics Letters 1999, 301 (1-2), 131-137

Parametri bibliometrici dichiarati dal candidato, relativi alle 30 pubblicazioni:

Database SCOPUS/ISI WOS

Numero totale di citazioni 830;

Numero medio di citazioni 27.67;

Impact factor totale 102.2;

Impact factor medio 3.41;

Numero lavori come Last Author 7;

Numero lavori come First author 7;

Numero lavori come Corresponding author 9;

La Commissione all'unanimità dichiara tutte **le pubblicazioni** come **valutabili**.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato presenta la lista della produzione complessiva pari a **N. 55 pubblicazioni** su riviste scientifiche con peer-review pubblicate nel periodo 1999-2016, **N. 2 pubblicazioni** (con DOI) in corso di stampa corredata da Parametri bibliometrici relativi e **due capitoli** di un libro.

Parametri bibliometrici dichiarati dal candidato:

Dati bibliometrici SCOPUS/ISI WOS

Numero totale di citazioni 1036;

Numero medio di citazioni 18.8;

Impact factor medio 3.16;

Hirsch (H) index 17;

Indice H normalizzato 1.22;

Indice Hirsch Contemporaneo (Hc) 14;

Numero lavori come Last Author 13;

Numero lavori come First author 10;

Numero lavori come Corresponding author 18.

Candidata Larisa Lvova

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

- 1) **Laurea in Chimica** conseguita il 21/06/1996 presso Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia con votazione 110/110 e lode
- 2) **Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche** (vedi traduzione diploma) conseguito il 16/12/1999 presso Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia
- 3) **Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche** conseguito il 02/03/2012 presso Università degli studi di Roma "Tor Vergata", Roma, Italia
- 4) **Abilitazione scientifica nazionale** a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/B2 (Fondamenti chimici delle tecnologie)
- 5) **Contratti di ricerca presso università in Italia e all'estero**



- a) Attività di ricerca (Post-Doc Fellow) presso Chemistry Department, Kwangwoon University, Seoul, Korea, 2000-2001.
- b) Attività di consulenza scientifica presso BriSence R&D Company, Copenhagen, Denmark, 2001-2002.
- c) Attività di ricerca presso Facoltà di Biologia (ricercatore a tempo determinato), Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia, 2002-2014.
- d) Borsa di studio su un progetto Europeo "ELEN-TOOL", EU 5th framework program presso Università degli studi di Roma "Tor Vergata", novembre 2003- ottobre 2004.
- e) Titolare di un Contratto di Collaborazione a Progetto Europeo "OMRISK", EU 6th framework program, 2005-2006, 2007-2008 presso Facoltà di Biologia, Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia.
- f) Titolare di un **assegno di ricerca** a Progetto, finanziato da Filas S.p.A. su un progetto dal titolo "Development of an "Electronic Tongue" system for quality control of potable and waste water, acronimo LIQUID" presso l'Università degli studi di Roma "Tor Vergata", Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche ed in collaborazione con Laboratorio dei Sensori Chimici del Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia, gennaio 2006- gennaio 2007 (**1 anno**).
- g) **Assegno di ricerca** sul progetto "Acquasense" del programma MISE "Industria 2015", maggio 2012-ottobre 2014, marzo 2016-febbraio 2017 (**2 anni e 6 mesi**)
- h) Attività di ricerca (ricercatore invitato) presso Federal State Budget Educational Institution of High Education "Saint-Petersburg State University of Information Technologies , Mechanics and Optics " (ITMO) come Invited researcher del programma del Ministero dell'Istruzione e della Scienza della Federazione Russa di titolo "Development and application of artificial sensory systems, for a wide range of real problems", codice 713572-N, ottobre 2014 - ottobre 2017.

6) Altri titoli presentati

- **socio-fondatore della società "Ecosens srl"** presso spin-off dell'Università degli studi di Roma "Tor Vergata" dal 2007 a 2012.
- 2014 finalista SIR 2014, progetto RBSI14DM64, "Design and development of multi-transduction nanocomposite chemical sensors for portable analytical systems of wide-range applications" classificato come B-type.
- revisore scientifico di riviste scientifiche internazionali;
- Membro del Editor board di Journal of Analytical Methods in Chemistry (ISSN: 2090-8865), Hindawi publishing
- Il Guest Editor di Special Issue of Sensors and Actuators B, Chemical volume 207B, 2015), dedicato al 80mo anniversario del Prof. Yu. Vlasov.
- Redattore principale (Main Editor) del libro "Multisensor Systems for Chemical Analysis - Materials and Sensors", Pan Stanford Publishing, L. Lvova, D. Kirsanov, A. Legin, C. Di Natale (Eds.), 420pp, ISBN9789814411158.

7) Seminari su invito

- 2013 Invited seminar for MIT-Skoltech initiative at MIT (Massachusetts Institute of Technology)
- 2014, 2015 Due seminari for "Saint-Petersburg State University of Information Technologies , Mechanics and Optics (ITMO)
- Invited symposia speaker and chairman ai congressi:
- 4th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, July 2- 7, 2006, Rome, Italy; 5th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, ICPP5, July 6- 11, 2008, Moscow, Russia
- Invited symposia speaker al 9th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, ICPP9, July 3- 7, 2016, Nanjing, China
- Keynote speaker al Primo Convegno Nazionale Sensori, Rome, February 15-17, 2012

8) Partecipazione a convegni e workshop (24 Contributi orali elencati) nel periodo 1998-2016:

- L. Lvova, "Electronic tongue" is the automatized system of potentiometric chemical sensors for analysis of complex liquids, 3th Russian Conference of Young Scientists and Specialists, Saint-Petersburg, Russia, December 4-10, 1998.
- L. Lvova, A. Legin, A. Smirnova, Yu. Vlasov, Poly(vinyl chloride) based thick film membranes for "electronic tongue" sensor array application, Sensors Conference 2000, 17-18 November 2000, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, Korea.
- L. Lvova, A. Legin, A. Rudnitskaya, Yu. Vlasov, "Electronic tongue" – an analytical instrument for multicomponent analysis in complex liquids, Symposium of Korean Chemical Society Electrochemistry Division, 18 November 2000, Seoul, Korea.



- L. Lvova, Hakhyun Nam, Geun Sig Cha, A. Legin, Yu. Vlasov, A planar potentiometric solid-state “Electronic tongue” sensor array for beverage tasting, Korean Electrochemical Society Meeting, 4-7 April 2001, Taegu, Korea.
- L. Lvova, H. Nam, G. S. Cha, A. Legin, Yu. Vlasov, An application of all-solid-state planar “Electronic tongue” sensor array for beverage tasting, International school of gas sensors in conjunction with the 3rd European school of the “Nose” network, May 28th - June 2nd, 2001, S. Cesarea Terme (Lecce), Italy.
- L. Lvova, Transformation of Nitrogen compounds in the initial stages of plant remains decomposition, 6th Russian Conference of Young Scientists and Specialists in Soil Science “Dokuchaev Readings” Saint-Petersburg, Russia, February 26 – March 1, 2003.
- L. Lvova, G. De Angelis, C. Montieri, T. Primadei, E. Martinelli, E. Mazzone, A. Pede, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D’Amico, An ‘Electronic tongue’ system based on an array of metallic potentiometric sensors, 3rd IEEE Sensors, October 23-27, 2004, Vienna, Austria
- L. Lvova, G. Verelli, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D’Amico, S. Mararychev-Mikhailov, Pt(II)TPP and Pt(IV)TPPCl₂ as Ionophores for Polymeric Membrane Sensors. Potentiometric and Theoretical Study, Pittcon 2005 Conference, Orlando, Florida, USA, February 27 – March 4, 2005.
- L. Lvova, M. Nadporozhskaya, Potentiometric completion as a modification of Thurin’s method for qualitative evaluation of soil organic matter, 9th Russian Conference of Young Scientists and Specialists in Soil Science “Dokuchaev Readings” Saint-Petersburg, Russia, March 2-4, 2006.
- L. Lvova, G. Verrelli, M. Stefanelli, S. Nardis, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D’Amico, S. Makarychev-Mikhailov, Pt(II)- and Pt(IV)- porphyrins as ionophores for solvent polymeric membrane electrodes, 4th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, July 2- 7, 2006, Rome, Italy.
- R. Paolesse, A. D’ Amico, C. Di Natale, L. Lvova, G. Verrelli, Chemical images of liquids by metalloporphyrin sensor arrays, ICPP5, Moscow, 6-11 July 2008.
- L. Lvova, A. D’Amico, C. Di Natale, R. Paolesse, G. Verrelli, Chemical sensors based on corrole receptors, ICPP5, Moscow, 6-11 July 2008.
- L. Lvova, M. Mastroianni, E. Martinelli, C. Di Natale, A. D’Amico, D. Fillipini, I. Lundström, R. Paolesse, Porphyrin hyphenated electropolymers: modeling the properties, synthesis and application in chemical sensors, ISOEN 2009, April 15-1, Brescia, Italy
- R. Paolesse, L. Lvova, P. Galloni, B. Floris, C. D. Natale, A. D’Amico, Porphyrin-Ferrocene conjugate based hyphenated opto-electrochemical sensors for transition metals detection, IMCS 14, July 11-14, 2010, Perth, Australia.
- L. Lvova, A. Paris, M. Mastroianni, G. Pomarico, M. Santonico, G. Pennazza, C. Di Natale, R. Paolesse, A. D’Amico, SWCNTs Modified with Porphyrin Units for Chemical Sensing Applications, Eurosenors XXIV, September 5-8, 2010, Linz, Austria
- L. Lvova, G. Pomarico, I. Spiridonov, O. Mednova, D. Kirsanov, A. Legin, C. Di Natale, A. D’Amico, R. Paolesse, Sensing materials with a concurrent sensitivity: design, synthesis and application in multisensory systems, ISOEN 2011, May 2-5, NY, USA
- L. Lvova, P. Mielle, C. Salles, S. Denis, C. Vergoignan, A. Barra, C. Di Natale, R. Paolesse, P. Temple-Boyer, G. Feron, An application of specific sensors for the monitoring of NaCl in soft cheeses, ISOEN 2011, May 2-5, NY, USA
- L. Lvova, D. Monti, M. Mastroianni, C. Di Natale, A. D’Amico, R. Paolesse, Porphyrin films for electrochemical and optical sensors development, Matrafured’ 2011, Dobogókö, Hungary, June 18–25, 2011
- L. Lvova, Z. Cao, C. Di Natale, I. Lundstrom, A. D’Amico, R. Paolesse, Porphyrin electropolymers as optoelectrochemical probe for the detection of Red-Ox analytes, Convegno Nazionale Sensori, Rome, 15-17 February, 2012.
- L. Lvova, M. Mastroianni, M. Stefanelli, S. Nardis, G. Pomarico, F. Mandoj, C. Di Natale, A. D’Amico, I. Lundstrom, R. Paolesse, Side-substituted porphyrins-based chemical sensors: last achievements and future trends, ICPP7, Jeju, South Korea, 1-6 July 2012.
- L. Lvova, C. Di Natale, I. Lundstrom, R. Paolesse, Multi-transduction sensing materials for Electronic Tongue applications, ISOEN 2013, July 2-5, Daegu, South Korea.
- C. Guanais Branchini, L. Lvova, L. Prodi, M. Sgarzi, N. Zaccheroni, E. Viaggiu, R. Congestri, L. Guzzella, F. Pozzoni, I. Lundström, C. Di Natale, R. Paolesse, Optical chemical sensors for cyanobacterial toxins detection, ISOEN 2015, 28 June-1 July 2015, Dijon, France.
- L. Lvova, D. Monti, C. Di Natale, R. Paolesse, Anion-Exchanger Side-Substituted Metalloporphyrin Ionophores: Systematic Anionic Selectivity Tailoring, ICPP8, Nanjing, China, 2-8 July 2016.
- L. Lvova, C. Di Natale, R. Paolesse, L. Giorgi, V. Fusi, A. Garau, V. Lippolis, Familiar optical sensors for Cadmium(II) and Zinc(II) ions detection, Eurosenors XXX, Budapest, Hungary, September 4-7, 2016



9)Premi

1996 Personal Award “Master project”, Saint-Petersburg State University, St. Petersburg, Russia
1998 Personal Award “Candidate project”, Saint-Petersburg State University
2005 Personal Grant of St. Petersburg Administration for young Scientists.

10)Progetti finanziati (partecipante o investigatore principale)

2012-2014 ACQUASENSE Made in Italy - Industria 2015
2005-2008 OMRISK EU 6th framework program (INCORUSSIA + NIS-1, Area D1)
2002-2004 ELEN-TOOL CRAFT QLK1-CT2002-71086,EU 5th framework program
2006-2007 LIQUID Finanziamento di fondiaria FILAS

11)Attività didattiche

- a) Titolare del corso di insegnamento “Some aspects of physical chemistry”, Laurea Magistrale in Chimica, Kwangwoon University, Seoul, South Korea, ottobre 2000-maggio 2001.
- b) Professore a contratto per il corso integrativo “Calcoli stechiometrici per equilibri chimici omogenei ed eterogenei e relativi applicazioni in dispositivi elettrochimici”, 5CFU, presso la Facoltà di Ingegneria, Università degli studi di Roma “Tor Vergata”, 2002-2010.
- c) Professore a contratto per il corso integrativo al corso di Chimica Generale, CdL in Chimica, Dipartimento di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, 16 CFU, 2009-2011.
- d) Professore a contratto per il corso di Chimica per l’Ingegneria presso, 9CFU, presso Facoltà di Ingegneria, Università degli studi di Roma “Tor Vergata”, 2010-2011.
- e) Professore a contratto per il corso di Chimica per l’Ingegneria presso, 2CFU, presso Facoltà di Ingegneria, Università degli studi di Roma “Tor Vergata”, 2011-2013.
- f) Professore a contratto per il corso integrativo “Complements of Stoichiometry” al corso “Fundamentals of Chemistry”, 9CFU, Corso Di Laurea Dm.270/04 in Engineering Sciences presso Facoltà di Ingegneria, Università degli studi di Roma “Tor Vergata”, 2013-2015.

12)Supervisore Tesi

Correlatore per tesi di laurea triennale e magistrale in Chimica, Ingegneria Ambientale, Ingegneria Elettronica, Ingegneria Medica, 2004-2015, assistenza per studenti in tesi PhD.

La Commissione all’unanimità dichiara i titoli sopraelencati come **valutabili**.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI –

La candidata presenta 30 pubblicazioni (**25 articoli** su riviste scientifiche - IF indicato e **5 capitoli di libro**), come da elenco:

1. S. S. Levitchev, A. L. Smimova, V. L. Khitrova, L. B. Lvova, A. V. Bratov Yu. G. Viasov, Photocurable carbonate-selective membranes for chemical sensors containing lipophilic additives, *Sens. Act. B*, 44 (1997) 397-401, **IF 4.75**
2. A. Legin, A. Smirnova, A. Rudnitskaya, L. Lvova, Yu. Vlasov, Chemical sensor array for multicomponent analysis of biological liquids, *Anal. Chim. Acta*, 385 (1999) 131-135, **IF 4.71**
3. C. Di Natale, R. Paolesse, A. Macagnano, A. Mantini, A. D’Amico, A. Legin, L. Lvova, A. Rudnitskaya, Y. Vlasov; Electronic nose and electronic tongue integration for improved classification of clinical and food samples, *Sens. Act. B*, 64 (2000) 15-21, **IF 4.75**
4. C. Di Natale, R. Paolesse, A. Macagnano, A. Mantini, A. D’Amico, M. Ubigli, A. Legin, L. Lvova, A. Rudnitskaya, Y. Vlasov, Application of a combined artificial olfaction and taste system to the quantification of relevant compounds in red wine, *Sens. Act. B* 69 (2000) 342-347, **IF 4.75**
5. Y.S. Choi, L. Lvova, J. H. Shin, S. H. Oh, C. S. Lee, B. H. Kim, G. S. Cha, H. Nam, Determination of Oceanic Carbon Dioxide Using a Carbonate-Selective Electrode, *Anal. Chem* 74 (2002) 2435-2440, **IF 5.88**
6. L. Lvova, S. S. Kim, A. Legin, Y. Vlasov, J. S. Yang, G. S. Cha, H. Nam, All-solid-state electronic tongue and its application for beverage analysis,



- Anal. Chim. Acta 468 (2002) 303–314, **IF 4.71**
7. A. Legin, A. Rudnitskaya, L. Lvova, Yu. Vlasov, C. Di Natale, A. D'Amico, Evaluation of Italian wine by the electronic tongue: recognition, quantitative analysis and correlation with human sensory perception, *Anal. Chim. Acta*, 484 (2003) 33–44, **IF 4.71**
8. L. Lvova, A. Legin, Yu. Vlasov, H. Nam, G.S. Cha, Multicomponent analysis of Korean green tea by means of disposable all-solid-state potentiometric electronic tongue microsystem, *Sens. Act B*, 95 (2003) 391–399, **IF 4.75**
9. L. Lvova, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D'Amico, Detection of alcohols in beverages: an application of porphyrin-based Electronic tongue, *Sens. Act B* 118 (2006) 439–447, **IF 4.75**
10. L. Lvova, E. Martinelli, E. Mazzone, A. Pede, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D'Amico, Electronic Tongue based on an Array of Metallic Potentiometric Sensors, *Talanta*, 70 (2006) 833–839, **IF 4.03**
11. M.N. Ahmad, M.M.S. Yap, C.C. Cheen, A.K.M. Shafiqul Islam, Z. Ismail, M. Shurif, A.Y. Md. Shakaff, L. Lvova, Disposable array sensor strip for quantification of sinensetin in *Orthosiphon stamineus* benth samples, *Microchim. Acta* 163 (2008) 113–119, **IF 4.83**
12. R. Paolesse, L. Lvova, S. Nardis, C. Di Natale, A. D'Amico, Chemical Images by Porphyrin arrays of sensors, *Microchim. Acta* 163 (2008) 103–112, **IF 4.83**
13. L. Lvova, F. Dini, E. Martinelli, A. Bergamini, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D'Amico, Clinical analysis of human urine by means of Electronic Tongue, *Talanta* 77 (2009) 1097–1104, **IF 4.03**
14. L. Tortora, M. Stefanelli, M. Mastroianni, L. Lvova, C. Di Natale, A. D'Amico, D. Filippini, I. Lundström, R. Paolesse, The hyphenated CSPT-potentiometric analytical system: An application for vegetable oil quality control, *Sens. Act B* 142 (2009) 457–463, **IF 4.75**
15. L. Lvova, G. Verrelli, M. Stefanelli, S. Nardis, C. Di Natale, A. D. Amico, S. Makarychev-Mikhailov, R. Paolesse, Platinum porphyrins as ionophores in polymeric membrane electrodes, *Analyst* 136 (2011) 4966 – 4976, **IF 4.11**
16. L. Lvova, M. Mastroianni, C. Di Natale, I. Lundström, R. Paolesse, Towards hyphenated sensors development: design and application of porphyrin electropolymer materials, *Electroanalysis* 24 (2012) 776–789, **IF 2.47**
17. L. Lvova, S. Denis, A. Barra, P. Mielle, C. Salles, C. Vergoignan, C. Di Natale, R. Paolesse, P. Temple-Boyer, G. Feron, Salt release monitoring with specific sensors in “in vitro” oral and digestive environments from soft cheeses, *Talanta* 97 (2012) 171–180, **IF 4.03**
18. L. Lvova, M. Mastroianni, G. Pomarico, M. Santonico, G. Pennazza, C. Di Natale, R. Paolesse, A. D'Amico, Carbon Nanotubes Modified with Porphyrin Units for Chemical Sensing of Gaseous Phase, *Sens. Act. B* 170 (2012) 163–171, **IF 4.75**
19. L. Lvova, C. Di Natale, R. Paolesse, Porphyrin-based chemical sensors and multisensor arrays operating in the liquid phase, *Sens. Act. B*, 179 (2013) 21–31, **IF 4.75**
20. C. Bazzicalupi, C. Caltagirone, Z. Cao, Q. Chen, C. Di Natale, A. Garau, V. Lippolis, L. Lvova, H. Liu, I. Lundström, M. C. Mostallino, M. Nieddu, R. Paolesse, L. Prodi, M. Sgarzi, N. Zaccheroni, Multimodal use of new coumarinbased fluorescent chemosensors: towards highly selective optical sensors for Hg²⁺ probing, *Chem. Eur. J.* 19 (2013) 14639 – 14653, **IF 5.73**
21. F. Mandoj, S. Nardis, R. Pudi, L. Lvova, F. R. Fronczek, K. M. Smith, L. Prodi, D. Genovese, R. Paolesse, β -Pyrazino-fused tetrarylporphyrins, *Dyes and Pigments* 99 (2013) 136–143, **IF 4.01**
22. L. Lvova, R. Pudi, P. Galloni, V. Lippolis, C. Di Natale, I. Lundstrom, R. Paolesse, Multi-transduction sensing films for Electronic Tongue applications, *Sens. Act B* 207B (2015) 1076–1086, **IF 4.75**
23. Y. Sivalingam, R. Pudi, G. Pomarico, L. Lvova, G. Pomarico, F. Basoli, A. Catini, A. Legin, R. Paolesse, C. Di Natale, The light modulation of the interaction of l-cysteine with porphyrins coated ZnO nanorods, *Sens. Act B* 209 (2015) 613–621, **IF 4.75**
24. V. Panchuk, L. Lvova, D. Kirsanov, C. Guanais Goncalves, C. Di Natale, R. Paolesse, Extending electronic tongue calibration lifetime through mathematical drift correction: case study of microcystin toxicity analysis in waters, *Sens. Act B* 237 (2016) 962–968, **IF 4.75**
25. L. Lvova, C. Guanais Goncalves, K. Petropoulos, L. Micheli, G. Volpe, D. Kirsanov, A. Legin, E. Viaggiu, R.



Congestri, L. Guzzella, F. Pozzoni, G. Palleschi, C. Di Natale, R. Paolesse, Electronic tongue for microcystins screening in waters, Biosens. Bioelectronics 80 (2016) 154–160, **IF 7.47**

26. **BOOK CHAPTER:** L. Lvova, R. Paolesse, C. Di Natale, E. Martinelli, E. Mazzone, A. Orsini, A. D'Amico, Chemical images of liquids, in: Byrnes, Jim (Ed.), Imaging for Detection and Identification, NATO Science for Peace and Security Series, vol. VIII, Springer, 2007, 264 p, pp.63-95

27. **BOOK CHAPTER:** L. Lvova, A. D'Amico, A. Pede, C. Di Natale, R. Paolesse, Metallic sensors in multisensory analysis, in Multisensor Systems for Chemical Analysis - Materials and Sensors, Pan Stanford Publishing, L. Lvova, D. Kirsanov, A. Legin, C. Di Natale (Eds.) 2014, pp. 69-138, ISBN 9789814411158.

28. **BOOK CHAPTER:** Z. Cao, L. Lvova, R. Paolesse, C. Di Natale, I. Lundström, A. D'Amico, Porphyrin Electropolymers as Opto-electrochemical Probe for the Detection of Red-ox Analytes Sensors, Lecture Notes in Electrical Engineering, 162 (2014) 49-55.

29. **BOOK CHAPTER:** C. Guanais Branchini, L. Lvova, C. Di Natale, R. Paolesse, Wine and combined electronic nose and tongue, in “Electronic Nose and Tongue in Food Science”, M.L. Rodriguez-Mendez Ed., ELSEVIER (Academic Press), 2016, p. 291-300.

30. **BOOK CHAPTER:** L. Lvova, Electronic tongue principles and applications in the food industry, in “Electronic Nose and Tongue in Food Science”, M.L. Rodriguez-Mendez Ed., ELSEVIER Academic Press), 2016, p. 149-160

Parametri bibliometrici dichiarati dalla candidata, relativi alle 30 pubblicazioni:

La candidata indica i fattori d’impatto relativi a 25 pubblicazioni.

La Commissione all’unanimità dichiara tutte le pubblicazioni come **valutabili**.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Dagli atti risulta che la candidata non presenta una lista con la produzione complessiva delle sue pubblicazioni su riviste scientifiche. Nel CV dichiara di aver pubblicato **45** “papers International” e presenta un elenco di **5 capitoli** di libri pubblicati (inclusi nell’elenco dei 30) e **uno** “accepted”.

Parametri bibliometrici dichiarati dalla candidata:

Dati bibliometrici SCOPUS/ISI WOS

Numero totale di citazioni 870;

Numero medio di citazioni $870/45=19.3$;

Impact factor totale 120;

Hirsch (H) index 15;

Indice H normalizzato $15/18=0.83$ (18 anni accademici);

**Candidata Olga Russina****VERIFICA TITOLI VALUTABILI**

- 1) **Diploma Laurea** in Fisica e Informatica Università "S. Seifullin" (Akmola, Kazakhstan) 1995 (dichiarato equipollente alla Laurea Magistrale in Fisica con votazione 110/110 con lode presso l'Università di Messina)
- 2) **Dottorato** in Scienze Naturali (Or. Rer. Nat.) su: "Indagine della dinamica microscopica nei pressi della transizione vetrosa" (dichiarato equipollente al titolo di Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali) Università Tecnica di Berlino 2004 e sua Dichiarazione di Valore rilasciata dall'Ambasciata Italiana in Germania
- 3) **Abilitazione** scientifica nazionale
Abilitato a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche)
- 4) **Contratti di ricerca** presso università in Italia e all'estero
 - Assistente di ricerca - Istituto di Sicurezza Radiologica ed Ecologica - Centro Nazionale Ricerca Nuclearè (Kurchatov, Kazakhstan) – 06/11/95-15/01/98
 - Post-Doc research associate - Dip."Materiali e Strumentazione" - Helmholtz Zentrum -Post-Doc Research Berlin (D) - 01/01/04-30/11/05
 - Assegno di ricerca Dip. Chimica - Univo Roma "Sapienza" (**sei anni**), per i seguenti periodi: 01/02/10-31/01/11, 01/06/11-31/05/12, 01/06/12-31/05/13, 01/06/13-31/05/14, 01/09/14-31/08/15, 01/09/15-31/08/16.
- 5) **Riconoscimenti scientifici**: Invited article, chair person, guest editor, nel periodo 2009-2016
 - Chair Person per la sessione "Ionic Liquids at Interfaces",
248th American Chemical Society Meeting, San Francisco (USA) 2014
 - Chair Person per la sessione "Polymer melts", 5° IDMRCS, Lille (FR) 2005
 - Articolo di Prospettive su invito sul Journal of Physical Chemistry Letters (JPCL, 3, 27 (2012)
 - Guest Editor - Special issue su J. Molecular Liquids su "Mesoscopic structure and dynamics in ionic liquids" 2015
 - Invited Articles
 - Contributo invitato per la special issue su "Ionic Liquids" su J. Solution Chemistry 2015
 - Contributo invitato per la special issue su "Ionic Liquids" su Chemical Communications 2012
 - Contributo invitato per la special issue su "Ionic Liquids" su J. Phys.: Condensed Matter 2009
- 6) **Partecipazioni a Congressi** internazionali – Invited Oral , Oral, Oral (coautore), Poster, nel periodo 2001-2016
 - 2016- "Mesoscopic structural organization in ILs and their binary mixtures"
Recent Advances in Molecular Spectroscopy , RAMS 2016, Hyderabad, India
 - Invited Oral Contribution
 - 2015- "Pressure induced structural changes in RTILs"
Molecular Liquids meet Ionic Liquids , EMLG, Rostock, Germany
 - Oral Contribution (co-author)
 - 2015- "Structural and dynamical properties of EAN-DMSO mixtures"
Molecular Liquids meet Ionic Liquids , EMLG, Rostock, Germany
 - Oral Contribution
 - 2015- "Critical and non-critical mesoscopic inhomogeneities in solutions of the protic ionic liquid ethyl ammonium nitrate and pentanol "
19th Symposium on Thermophysical Properties , Boulder, Colorado, USA
 - Oral Contribution (coauthor)
 - 2014- "EAN/Methanol mixtures Amphiphile meets amphiphile"
248th American Chemical Society Meeting , San-Francisco, USA
 - Invited Oral Contribution
 - 2013- "Local order in protic ionic liquid/methanol mixtures"
7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona, Spain
 - Invited Oral Contribution
 - 2011- "New experimental evidences supporting the mesoscopic segregation model in RTILs"
154th Faraday Discussions, Belfast, UK
 - Invited Oral Contribution



- 2011-“Morphology of Poly(Ethylene Oxide)-RTILS Mixtures: SAXS and MD Studies”
4th Conference on Ionic liquids (COIL) ; Washington, USA
Oral Contribution (co-author)
- 2011-“On the nature of nm-scale heterogeneities in ionic liquids”
Bunsen-Tagung, 110° Congresso Società Chimica Fisica Tedesca. Berlino (D)
Oral Contribution (co-author)
- 2011-“Short/Medium-to-Long Range Order correlations in Room Temperature Ionic Liquids”
Analysis of diffraction data in real space (ADD-2011), Grenoble , FRANCE
Poster
- 2010-“Complexity of structural and dynamic features in RTILs”
International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED, Rome
Poster
- 2010-“Mesoscopic organization in ionic liquids: structural and dynamic implications”
XXXIX Congresso Nazionale di Chimica Fisica. Stresa
Poster
- 2009-“Phase diagram and structural properties of piperidinium based ionic liquids”
6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Rome
Oral Contribution (co-author)
- 2005-“Structural changes in DaPP around glass transition”
5th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems - Lille, France
Oral Contribution
- 2004-“Structure /dynamics correlations in DaPP”
Quasielastic Neutron Scattering (QENS2004), Arcachon (FR)
Oral Contribution
- 2003-“Experimental emulation of Repetition Rate Multiplication, a novel technique for neutron time-of-flight spectroscopy on pulsed sources”
16th Meeting of the International Collaboration on Advanced Neutron Sources ICANS – XVI, Düsseldorf-Neuss, Germany
Poster
- 2002-“Dynamics correlations around the glass transition”
International Congress on Neutron Scattering, Munchen, Germany
Poster
- 2001-Fast relaxation dynamics in glasses with different fragility
4th International Discussion Meeting on Relaxation in Complex Systems - Hersonissos, Crete, Greece
Poster
- 7)**Attività di Formazione** - Partecipazioni a scuole nazionali e internazionali
Workshop on Analysis of Diffraction Data in Real Space - ILL & ESRF (Grenoble, FR) 2011
Dinamica Molecolare Classica per la simulazione di sistemi biologici - CASPUR (Roma) 2011
Calcolo scientifico e Tecnico in linguaggio FORTRAN95 - CASPUR (Roma) 2011
- 8)**Organizzazione** di Grants per Attività Progettuale
- a)come investigatore principale (PI)
2013 Progetto Scientifico: "Struttura e dinamica di sali liquidi fluorurati" (PI); Borsa per Assegno di Ricerca, Ateneo Università di Roma I
- 2012 Standard HPC Grant for RP "Rationalization of bulk performances of Alkali metal Oligoether Carboxylates" (PI) CASPUR
- b)come investigatore partecipante
2010, 2011, 2013, 2014 Ateneo Università di Roma, Progetti annuali
PRIN 2009, "Struttura e dinamica di liquidi ionici e loro miscele”
- c)**Organizzazione** e Partecipazione a Progetti presso:
-Large Scale Facilities: ILL, BENSC, Esrf, Periodo 2001-2016
-Helmholtz Zentrum Berlin – 2015



-Responsabile tecnico del Diffrattometro del Laboratorio di Nanotecnologie e Nanoscienze della Sapienza.

9) **Periodi di Allontanamento** non volontario dall'attività di ricerca.

A seguito di due figli nati in data 25.05.2006 e 17.01.2009, l'attività scientifica è stata ridotta.

10) **Altro.**

Tre lettere di presentazione: Prof. E. W. Castner (USA), Prof. A. Samanta (India), Prof. W. Schroer (Germania).

La Commissione all'unanimità dichiara i titoli sopraelencati come **valutabili**.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

La candidata presenta 30 pubblicazioni, come da elenco, corredato da alcuni indicatori bibliometrici.

30. O. Russina, S. De Santis, L. Gontrani

Micro- and mesoscopic structural features of a bio-based choline-amino acid ionic liquid

RSC Advances 6, 34737 (2016)

29. F. Lo Celso, B. Aoun, A. Triolo, O. Russina

Liquid structure of dibutyl-sulfoxide.

Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 15980 (2016)

28. W. Schroer, A. Triolo, O. Russina

Nature of mesoscopic organization in protic ionic liquid-alcohol mixtures.

Journal of Physical Chemistry B 120, 2638-2643 (2016)

27. O. Russina, F. Lo Celso and A. Triolo

Pressure-responsive mesoscopic structure in room temperature ionic liquids.

Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 29496 (2015)

26. O. Russina, W. Schroer, and A. Triolo

Mesoscopic structural and dynamic organization in ionic liquids

J. of Molecular Liquids 210, 161 (2015)

25. L.M. Varela, T. Mendez-Morales, J. Carrete, V. Gomez-Gonzalez, B. Docampo-Alvarez, L.J. Gallego, O. Cabeza, O. Russina

Solvation of molecular cosolvents and inorganic salts in ionic liquids: A review of molecular dynamics simulations

J. Molecular Liquids 210, 178 (2015)

24. T. Mendez-Morales, J. Carrete, J. R. Rodriguez, O. Cabeza, L. J. Gallego, O. Russina, L.M. Varela

Nanostructure of mixtures of protic ionic liquids and lithium salts: effect of alkyl chain length

Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 5298 (2015)

23. O. Russina, R. Caminiti, T. Mendez-Morales, J. Carrete, O. Cabeza, L. J. Gallego, L.M. Varela, A. Triolo

How does lithium nitrate dissolve in a protic ionic liquid?

J. Molecular Liquids 205, 16 (2015)

22. O. Russina, A. Mariani, R. Caminiti, and A. Triolo

Structure of a binary mixture of ethylammonium nitrate and methanol.

J. Solution Chemistry 44, 669-685 (2015)

21. O. Russina, M. Macchiagodena, B. Kirchner, A. Mariani, B. Aoun, M. Russina, R. Caminiti and A. Triolo

Association in ethylammonium nitrate-dimethyl sulfoxide mixtures: first structural and dynamical evidences.

Journal of Non-Crystalline Solids 407, 333-338 (2015).

20. O. Russina, A. Sferrazza, R. Caminiti, and A. Triolo

Amphiphile Meets Amphiphile: Beyond the Polar-Apolar Dualism in Ionic Liquid/Alcohol Mixtures

J. Physical Chemistry Letters 5, 1738 (2014).



19. O. Russina, F. Lo Celso, M. Di Michiel, S. Passerini, G. B. Appetecchi, F. Castiglione, A. Mele, R. Caminiti, and A. Triolo
Mesoscopic structural organization in triphilic room temperature ionic liquids.
Faraday Discussions 167, 499 (2013)
18. M. A. A. Rocha, C. Neves, M. Freire, O. Russina, A. Triolo, J. A. P. Coutinho, and L. Santos
Alkylimidazolium Based Ionic Liquids: Impact of Cation Symmetry on their Nanoscale Structural Organization
J. Physical Chemistry B 117, 10889 (2013)
17. O. Russina, R. Caminiti, A. Triolo, S. Rajamani, B. Melai, A. Bertoli and C. Chiappe
Physico-chemical properties and nanoscale morphology in N-alkyl-N-methylmorpholinium dicyanamide room temperature ionic liquids
J. Molecular Liquids 187, 252 (2013)
16. A. Triolo, O. Russina, R. Caminiti, H. Shirota, H. Y. Lee, C. S. Santos, N. S. Murthy and E. W. Castner
Comparing intermediate range order for alkyl- vs. ether-substituted cations in ionic liquids.
Chemical Communications 48, 4959 (2012)
15. F. C. Marincola, C. Piras, O. Russina, L. Gontrani, G. Saba, A. Iai
NMR Investigation of Imidazolium-Based Ionic Liquids and Their Aqueous Mixtures
ChemPhysChem 13, 1339 (2012)
14. Russina O and Triolo A
New experimental evidence supporting the mesoscopic segregation model in room temperature ionic liquids
Faraday Discussions 154, 94 (2012)
13. Russina O, Triolo A, Gontrani L, Caminiti R
Mesoscopic Structural Heterogeneities in Room-Temperature Ionic Liquids
J. Phys. Chem. Lett., 3, 27 (2012)
12. Russina O, Fazio B, Schmidt C, Triolo A
Structural organisation and phase behaviour of 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate: an high pressure Raman spectroscopy study.
PCCP 13, 12067 (2011)
11. Zheng W, Mohammed A, Hines L.G, Xiao D, Martienes O.J, Bartsch R.A., Simon S.L, Russina O, Triolo A and Quitevis E.L
Effect of cation symmetry on the morphology and physicochemical properties of imidazolium ionic liquids.
J.Phys.Chem.B 114, 6572 (2011)
10. Russina O., Gontrani L., Fazio B., Lombardo D., Triolo A, Caminiti R
Selected chemical-physical properties and structural heterogeneities in 1-ethyl-3-methylimidazolium alkyl- sulfate room temperature ionic liquids.
Chem. Phys. Lett 493, 259 (2010)
9. O. Russina, A. Triolo, L. Gontrani, R. Caminiti, D. Xiao, L. G. Hines, Jr. R. A. Bartsch, E. L. Quitevis, N. Pletchkova, K. R. Seddon
Morphology and intermolecular dynamics of 1-alkyl-3-methylimidazolium bis((trifluoromethane)sulfonyl)amide ionic liquids.
J. Phys.: Cond. Matt. 21 424121 (2009)
8. O. Russina, A. Triolo, M. Beiner, C. Pappas, V. Arrighi, M. Russina, T. Unruh, C. L. Mullan, C. Hardacre



Temperature dependence of the primary relaxation in 1-hexyl,3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide.

J. Phys. Chem. B 113, 8469 (2009)

7. D. Xiao, L. G. Hines, S. Li, R. A. Bartsch, E. L. Quitevis, O. Russina, A. Triolo

Effect of cation symmetry and alkyl chain length on the structure and intermolecular dynamics of 1,3-dialkylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide ionic liquids

J. Phys. Chem. B 113, 6426 (2009)

6. A. Triolo, O. Russina, B. Fazio, G. B. Appetecchi, M. Carewska, S. Passerini

Nanoscale organization in piperidinium based room temperature ionic liquids

J. Chem. Phys. 130, 164521 (2009)

5. A. Triolo, O. Russina, B. Fazio, R. Triolo, E. Di Cola

Morphology of 1-alkyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate room temperature ionic liquids.

Chemical Physics Letters 457, 362 (2008)

4. A. Triolo, O. Russina, H.-J. Bleif and E. Di Cola

Nanoscale segregation in room temperature ionic liquids

Journal of Physical Chemistry B 111, 4641 (2007)

3. A. Triolo, A. Mandanici, O. Russina, V. Rodriguez-Mora, M. Cutroni, C. Hardacre, M.

Nieuwenhuyzen, H.-J. Bleif, L. Keller and M. A. Ramos

Thermodynamics, structure and dynamics in room temperature ionic liquids: the case of 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate ([bmim][PF₆])

Journal of Physical Chemistry B 110, 21357-21364 (2006)

2. O. Russina, A. Triolo, Y. Aihara, M. T. F. Telling and H. Grimm

Quasi elastic neutron scattering investigation of dynamics in polymer electrolytes

Macromolecules 37, 8653 (2004)

1. O. Russina, M. Russina, F. Mezei, R. Lechner, J. Pieper, A. Desmedt

Dynamic correlations around the glass transition in systems with different degrees of fragility

Applied Physics A 74, 1192 (2002)

Parametri bibliometrici dichiarati dalla candidata:

Numero totale di citazioni 2012

Numero medio di citazioni per pubblicazione 67.1

Impact Factor Totale 107.13

Impact Factor medio per pubblicazione 3.57

Numero Articoli come Primo Autore 17

Numero Articoli come Ultimo Autore 3

Numero Articoli come Autore Corrispondente 12

La Commissione all'unanimità dichiara tutte le pubblicazioni come **valutabili**.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata presenta la lista della produzione complessiva pari a **N. 40 pubblicazioni** su riviste scientifiche con peer-review e **un capitolo** di libro, pubblicati nel periodo 2002-2016, corredata da Parametri bibliometrici relativi.

Parametri bibliometrici dichiarati dalla candidata:

Data Base ISI-WoS

Numero totale Citazioni 2344

Numero Citazioni Medio per pubblicazione 58.6

Impact Factor Totale 136.5

Hirsch (H) index 21



Candidato Francesco Sebastianelli

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

1) **Diploma di Laurea in Chimica**, Roma, Università degli Studi di Roma “La Sapienza”, conseguito in data 13/04/2000

2) **Diploma di Dottore di ricerca in Scienze Chimiche**, Roma, Università degli studi di Roma “La Sapienza”, XVI ciclo, a.a. 2000/01-2002/03, conseguito il 19/01/2004

3) **Abilitazione scientifica nazionale**

Abilitato a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche)

4) **Contratti di ricerca** presso università in Italia e all'estero

-Contratto di collaborazione coordinata e continuativa per il progetto di ricerca “Strutture di cluster con impurezze ioniche” presso il gruppo di Chimica Fisica Teorica diretto dal prof. F.A. Gianturco, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma “La Sapienza” (Dicembre 2003-Settembre 2004).

-Borsa di studio postdottorale nel gruppo di chimica fisica del professor Zlatko Bačić, New York University, New York, USA, per lo studio di cluster di idrogeno con impurezze neutre e analisi energetica e strutturale di idrogeno molecolare in clathrate hydrate (gas storage) con metodi Montecarlo quantistici. Settembre 2004-maggio 2007.

-Contratto di collaborazione coordinata e continuativa presso il gruppo di Chimica Fisica Teorica diretto dal prof. F.A. Gianturco, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma “La Sapienza” per il progetto di ricerca “Scattering di elettroni su molecole di interesse biologico”. Il contratto copre il periodo 1/6/2007 – 31/12/2008.

-Borsa di studio presso il centro di calcolo interuniversitario CASPUR per una collaborazione con il Dip.to di Chimica dell'Università “La Sapienza” per lo studio del trattamento della dinamica del *radiation damage* in biosistemi. Il contratto copre il periodo 1/2/2009 – 1/2/2011.

-Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università “Sapienza” di Roma dal titolo “Sistemi energetici innovativi finalizzati all'utilizzo delle FER”. Dal 1 febbraio 2012 al 31 gennaio 2015 (**3 anni**). Tematica: modellizzazione per il riconoscimento di sorgenti di inquinamento atmosferico con metodi di algoritmi genetici.

5) **Premi per attività di ricerca**

-Premio di laurea “G. Stampacchia” (anno 2002) destinato alla prima opera pubblicata da un laureato in Chimica, Roma, Università degli Studi di Roma “La Sapienza”.

6) **Partecipazioni come relatore a conferenze internazionali (invited speaker)**

Dynamics evolution of core formation in small Rare gas clusters with ionic impurities, ISAAC 2003, S.Petersburg, Russia.

HF and CO in clusters of hydrogen: Size evolution of structural, energetic and dynamical aspects of quantum solvation, PACIFICHEM 2005, Honolulu, Hawaii, USA.

Dynamical role of metastable anions from carbon-rich molecules in planetary atmospheres, DySoN 2010, Rome, Italy.

7) **Partecipazioni ad altro titolo a scuole e conferenze nazionali e internazionali**

Charles Coulson Summer School in Theoretical Chemistry, Oxford, UK 08-16 September 1996.

Gaussian Workshop, Caspur, Rome, Italy 21-24 April 1998.

European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP) VI, Siena, Italy 14-18 July 1998 (con presentazione di un poster).

1st European School of Computational Chemistry on Reaction and Molecular Dynamics, Perugia, Italy 27 June – 01 July 1999 (con presentazione di un poster).

Euro Summer School on Dynamics of Molecular Collision relevant to the evolution of interstellar matter, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel 11-15 September 2000.

European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC 2000), Jerusalem, Israel 17-22 September 2000 (con presentazione di un poster).



European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP VII), Berlin, Germany 02-06 April 2001 (con presentazione di un poster).

Riunione Scientifica del programma di Ricerche Cofinanziate MURST 2000-2002, Rome, Italy Università "La Sapienza", 27-28 June 2001 (presentazione orale).

Euro Winter School on Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: from Theory to Algorithms, Kerkrade, Netherlands 25 February – 01 March 2002 (con presentazione di un poster).

Corso di Fortran90 per il calcolo scientifico intensivo, CILEA di Milan, Italy 05-07 March 2002.

Istituto Nazionale di Fisica della Materia (INFN) Meeting, Bari, Italy 24-28/07/2002 (con presentazione di un poster).

European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XIV), Istanbul, Turkey 01-06 September 2002 (con presentazione di un poster).

International Symposium 'Atomic Cluster Collisions' (ISAAC 2003), S. Petersburg, Russia 18-21 July 2003 (plenary lecture).

International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2005), Honolulu, Hawaii, USA 15-20 December 2005 (plenary lecture).

Electron Controlled Chemical Lithography (ECCL08), Lisbon, Portugal 12-16 March 2008 (con presentazione di un poster).

Control of Molecular Processes (CMP08), Roma 2-4 November 2008 (con presentazione di un poster).

Chemical Control with Electrons and Protons (ESF-FWF Conference), Obergugl, Austria 22-27 November 2008 (con presentazione di un poster).

Dynamics of Systems on the Nanoscale (DySoN Conference 2010), Rome, Italy 16-19 November 2010 (plenary lecture)

8). Affiliazioni scientifiche e professionali

American Chemical Society

9). Attività didattica

Cultore della materia presso il dipartimento di chimica dell'Università di Roma "Sapienza".

Esercitazioni per i corsi di *Chimica Fisica* e *Meccanica Quantistica* presso il dipartimento di chimica dell'Università di Roma "Sapienza".

10) Lingue conosciute

Inglese ottimo livello scritto/parlato.

La Commissione all'unanimità dichiara i titoli sopraelencati come **valutabili**

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI –

Il candidato presenta 30 pubblicazioni, come da elenco:

1. **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and E. Yurtsever

Finding the global minima of $(\text{Ne})_n$ clusters with non-empirical models: a comparison of results
Chemical Physics **290** 279-295 (2003).

2. **F. Sebastianelli**, I. Baccarelli, C. Di Paola and F.A. Gianturco

Structural and quantum effects from anionic centers in rare gas clusters: the $(\text{Ne})_n\text{H}$ - and $(\text{Ne})_{n+1}$ Systems

Journal of Chemical Physics **119** 5570-5582 (2003).

3. **F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco

Attachment and solvation of the H-dopant: structures of Ne_nH - and Ar_nH - clusters from energyoptimizing calculations

Journal of Physical Chemistry A **108** 8633-8640 (2004).

4. E. Bodo, **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and I. Pino

Microsolvation of LiH^+ in helium clusters: many-body effects and additivity models for the interaction forces

Journal of Physical Chemistry A **109** 4252-4260 (2005).



5. **F. Sebastianelli**, E. Bodo, I. Baccarelli, C. Di Paola, F.A. Gianturco and M. Yurtsever
Microsolution of Li⁺ in bosonic helium clusters. I. Many-body effects on the structures of the small aggregates
Computational Materials Science **35** 261-267 (2006).
6. **F. Sebastianelli**, Y.S. Elmatad, H. Jiang and Z. Bačić
HF in clusters of molecular hydrogen: II. Quantum solvation by H₂ isotopomers, cluster rigidity, and comparison with CO-doped parahydrogen clusters
Journal of Chemical Physics **125** art. n. 164313, pp. 1-10 (2006).
7. M. Xu, Y.S. Elmatad, **F. Sebastianelli**, J.W. Moskowitz and Z. Bačić
Hydrogen molecule in the small dodecahedral cage of a clathrate hydrate: quantum fivedimensional calculations of the coupled translation-rotation eigenstates
Journal of Physical Chemistry B **110** 24806-24811 (2006).
8. **F. Sebastianelli**, M. Xu, Y.S. Elmatad, J.W. Moskowitz and Z. Bačić
Hydrogen molecules in the small dodecahedral cage of a clathrate hydrate: quantum translationrotation dynamics of the confined molecules
Journal of Physical Chemistry C **111** 2497-2504 (2007).
9. **F. Sebastianelli**, M. Xu, D.K. Kanan and Z. Bačić
One and two hydrogen molecules in the large cage of the structure II clathrate hydrate: quantum translation-rotation dynamics close to the cage wall
Journal of Physical Chemistry A **111** 6115-6121 (2007).
10. M. Xu, **F. Sebastianelli** and Z. Bačić
Hydrogen molecule in the small dodecahedral cage of a clathrate hydrate: quantum translationrotation dynamics at higher excitation energies
Journal of Physical Chemistry A **111** 12763-12771 (2007).
11. M. Xu, **F. Sebastianelli**, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
Quantum dynamics of coupled translational and rotational motions of H₂ inside C₆₀
Journal of Chemical Physics **128** art. n. 011101, pp. 1-4 (2008).
12. F.A. Gianturco, **F. Sebastianelli**, R.R. Lucchese, I. Baccarelli and N. Sanna
Ring-breaking electron attachment to uracil: following bond dissociations via evolving resonances
Journal of Chemical Physics **128** art. n. 174302, pp. 1-8 (2008).
13. M. Xu, **F. Sebastianelli** and Z. Bačić
Quantum dynamics of H₂, D₂, and HD in the small dodecahedral cage of clathrate hydrate: evaluating H₂-water nanocage interaction potentials by comparison of theory with inelastic neutron scattering experiments
Journal of Chemical Physics **128** art. n. 244715, pp. 1-13 (2008).
14. M. Xu, **F. Sebastianelli**, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
H₂, HD, and D₂ inside C₆₀: coupled translational-rotational eigenstates of the endohedral molecules from quantum five-dimensional calculations
Journal of Chemical Physics **129** art. n. 064313, pp. 1-9 (2008).
15. **F. Sebastianelli**, M. Xu and Z. Bačić
Quantum dynamics of small H₂ and D₂ clusters in the large cage of structure II clathrate hydrate: energetics, occupancy, and vibrationally averaged cluster structures
Journal of Chemical Physics **129** art. n. 244706, pp. 1-9 (2008).
16. I. Baccarelli, **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and N. Sanna
Modelling dissociative dynamics of biosystems after metastable electron attachment: the sugar backbones
European Physical Journal D **51** 131-136 (2009).
17. M. Xu, **F. Sebastianelli**, B.R. Gibbons, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
Coupled translation-rotation eigenstates of H₂ in C₆₀ and C₇₀ on the spectroscopically optimized interaction potential: effects of cage anisotropy on the energy level structure and assignments
Journal of Chemical Physics **130** art. n. 224306, pp. 1-14 (2009).



18. M. Xu, **F. Sebastianelli** and Z. Bačić
Coupled translation-rotation eigenstates of H₂, HD, and D₂ in the large cage of structure II clathrate hydrate: comparison with the small cage and rotational Raman Spectroscopy
Journal of Physical Chemistry A **113** 7601-7609 (2009).
19. **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco, T. Stoecklin and I. Baccarelli
Scattering of electrons by gaseous CS(1 Σ): the role of short-range forces on the very-low energy 2Σ resonance
Chemical Physics Letters **476** 182-185 (2009).
20. **F. Sebastianelli**, M. Xu, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
Hydrogen molecules inside fullerene C₇₀: quantum dynamics, energetics, maximum occupancy, and comparison with C₆₀
Journal of the American Chemical Society **132** 9826-9832 (2010).
21. **F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco
Stabilizing dicyanoacetylene anions in planetary atmospheres: quantum dynamics of its transient negative ions
European Physical Journal D **59** 389-398 (2010).
22. A. Witt, **F. Sebastianelli**, M.E. Tuckerman and Z. Bačić
Path integral molecular dynamics study of small H₂ clusters in the large cage of structure II clathrate hydrate: temperature dependence of quantum spatial distributions
Journal of Physical Chemistry C **114** 20775-20782 (2010).
23. **F. Sebastianelli**, F. Carelli and F.A. Gianturco
Modeling chemical evolution in a cold molecular plasma: quantum dynamics of the CF₂-intermediates after electron attachment
Journal of Physical Chemistry A **115** 11531-11543 (2011).
24. **F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco
Metastable anions of polyynes: Dynamics of fragmentation/stabilization in planetary atmospheres after electron attachment
European Physical Journal D **66** art. n. 41, pp. 1-9 (2012).
25. **F. Sebastianelli**, F. Carelli and F.A. Gianturco
Forming (NCCN)-by quantum scattering: a modeling for Titan's atmosphere
Chemical Physics **398** 199-205 (2012).
26. F. Carelli, T. Grassi, **F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco
Electron-attachment rates for carbon-rich molecules in protoplanetary atmospheres: the role of chemical differences
Monthly Notice of the Royal Astronomical Society **428** 1181-1184 (2013).
27. I. Baccarelli, **F. Sebastianelli**, B.M. Nestmann and F.A. Gianturco
Forming metastable carbon-rich anions in planetary atmospheres: the case of diacetylene
European Physical Journal D **67** art. n. 93, pp. 1-8 (2013).
28. A.G. Sanz, M.C. Fuss, F. Blanco, F. Carelli, **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and G. Garcia
Electron scattering cross sections from anthracene over a broad energy range (0.00001-10,000 eV)
Applied Radiation and Isotopes **83** 68-76 (2014).
29. F. Carelli, F.A. Gianturco, M. Satta, **F. Sebastianelli**
Attaching electrons to a 3-ring acene: Structures and dynamics of anions in gas-phase anthracene
International Journal of Mass Spectrometry **365-366** 377-383 (2014).
30. A. Cantelli, F. D'Orta, A. Cattini, **F. Sebastianelli**, L. Cedola
Application of genetic algorithm for the simultaneous identification of atmospheric pollution sources
Atmospheric Environment **115**, 36-46 (2015).
- Il candidato non dichiara alcun Parametro bibliometrico.

La Commissione all'unanimità dichiara tutte le **pubblicazioni** come **valutabili**.



CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato presenta una produzione complessiva pari a N. 50 pubblicazioni su riviste scientifiche con peer-review pubblicate nel periodo 2000-2015 e 2 capitoli di libri.

Parametri bibliometrici dichiarati dal candidato:

Numero totale di citazioni 749,

Numero medio di citazioni 15,

Hirsch (H) index 17

Letto, approvato e sottoscritto, 21 Novembre 2016

La Commissione

Prof. Nicolae Viorel PAVEL presidente

Prof. Eugenio CAPONETTI membro

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU segretario

Il Prof. Eugenio CAPONETTI e la Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU essendo collegati per via telematica allegano la sottoscrizione datata e firmata.



PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B 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.R. N. 1900/2016 DEL 03.08.2016.

(Codice Concorso 2016RTDB010, pubblicato sulla Gazzetta Ufficiale – IV serie speciale n. 64 del 12.08.2016)

ALLEGATO D AL VERBALE N. 3 - TITOLI E PUBBLICAZIONI VALUTABILI

Candidato Lorenzo Gontrani

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

La commissione ha preso in esame il curriculum ed i titoli presentati dal candidato ai fini della valutazione comparativa. Di seguito si riportano i dati più significativi della documentazione presentata.

1) **Diploma Laurea** Laurea in Chimica (1998), Sapienza Università di Roma e allegata lista degli esami sostenuti.

2) **Dottorato** di Ricerca in Scienze Chimiche, (2002), Università di Pisa.

3) **Abilitazione** scientifica nazionale

Abilitato a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

4) **Altri titoli** di studio:

- Cambridge First Certificate in English, conseguito a giugno 1990, presso The British Institute - Roma

- Maturità scientifica (1992) Liceo Scientifico "A. Righi", Roma.

5) **Contratti di ricerca**

Assegni di ricerca (**6 anni**):

a) assegno di ricerca presso Università degli Studi di CAGLIARI, dipartimento di Scienze Chimiche, dal 16/11/2007 al 15/11/2008;

b) assegno di ricerca presso Università degli Studi di ROMA "La Sapienza", dipartimento di Scienze della Terra, dal 01/07/2009 al 30/06/2010;

c) assegno di ricerca presso Università degli Studi di ROMA "La Sapienza", dipartimento di Chimica, dal 01/05/2014 al 30/04/2015;

d) assegno di ricerca presso Università degli Studi di ROMA "La Sapienza", dipartimento di Chimica, dal 01/02/2016 al 31/01/2017;

e) Collaboratore di ricerca (FIRB) National Research Council, Structure of Matter Department dal 01/05/2011 al 30/04/2014

f) Ricercatore - Colosseum Combinatorial Centre for Technology (Rome) – Biotech MIUR startup dal 01/10/2002 al 31/05/2006

g) Borsa presso Italian Supercomputing Centre (CASPUR) dal 01/06/2006 al 15/11/2007

6) **Riconoscimenti scientifici**: Coeditor di un libro: The Structure of Ionic Liquids Soft and Biological Matter, Springer International Publishing, 2014

7) **Attività di Formazione** - Partecipazioni a scuole nazionali e internazionali

1998 Gaussian Workshop CASPUR

1999 Scuola di Calcolo Parallelo CINECA

2004 Corso sulla privacy (Legge 675/1996) CONSIPA

2005 Scuola estiva di calcolo avanzato CASPUR

2005 L'impatto della Bioinformatica sulle scienze biomediche IDI

2007 Message-Passing Programming with MPI EPCC (Edinburgh, UK)

2007 6th workshop on molecular theories and simulations, Gaeta, Sapienza University

2009 Ionic Liquid force field parametrization in Prof. A. H. Padua group Blaise Pascal University (Clermont-Ferrand, FR)

2010 Advances in the Implementation of Polarizable Force Fields for Molecular Simulations



CECAM (Lausanne, CH)

2013 Analysis of Diffraction Data in Real Space ILL&ESRF (Grenoble, FR)

2016 Introduction to Marconi HPC Cluster for users and developers CNR/CINECA

9) **Partecipazioni a Congressi nazionali ed internazionali**

Presenta un elenco di 18 contributi Oral o poster presentati nel periodo 2006-2016, su argomenti correlati con lo studio di ioni liquidi.

10) **Organizzazione** di Grants per Attività Progettuale

a) come investigatore principale

2009-2012 Caspur grants: tempo di calcolo per 4 progetti su liquidi ionici.

b) come investigatore partecipante

2002 Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa"

MURST (now MIUR), N° Art11 Legge 451/94 presso C4T, biotech

2010, 2011, 2013, 2014 Ateneo Università di Roma, Progetti annuali

PRIN 2009, "Struttura e dinamica di liquidi ionici e loro miscele"

2011-2014 FIRB project : Structure and dynamics of ionic liquids

2013-2014 Tre progetti che riguardano lo studio di liquidi ionici e affini e loro applicazioni.

11) **Attività didattica**

Lezioni teoriche e pratiche per un corso di Chimica Computazionale /Chimica Fisica III aa. 2011-2015.

Lezioni teoriche e pratiche per un corso di Chimica Computazionale 2002.

TESI DI DOTTORATO

Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, (2002), Università di Pisa.

Il lavoro di dottorato dal titolo "Studio delle proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico con metodi teorico-computazionali. Esempi di applicazioni di metodi teorici di vario tipo e sofisticazione allo studio di sistemi biologici di differente complessità" è coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

Il candidato presenta 30 pubblicazioni, come da elenco, corredato da alcuni indicatori bibliometrici.

30) Campetella, M.; Bovi, D.; Caminiti, R.; Guidoni, L.; Bencivenni, L.; Gontrani, L., *Structural and vibrational study of 2-MethoxyEthylAmmonium nitrate (2-OMeEAN): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics*, Journal of Chemical Physics, 2016, 145, 024507

29) Mariani, A.; Caminiti, R.; Campetella, M.; Gontrani, L., *Pressure-induced mesoscopic disorder in protic ionic liquids: first computational study*, Physical Chemistry Chemical Physics 2016, 18 (4), 2297-2302

28) Salma, U.; Ballirano, P.; Usula, M.; Caminiti, R.; Plechkova, N. V.; Seddon, K. R.; Gontrani, L., *A new insight into the nanostructure of alkylammonium alkanoates based ionic liquids in water*, Physical Chemistry Chemical Physics 2016, 18 (16), 11497-11502

27) Tanzi, L.; Nardone, M.; Benassi, P.; Ramondo, F.; Caminiti, R.; Gontrani, L., *Choline salicylate ionic liquid by X-ray scattering, vibrational spectroscopy and molecular dynamics*, Journal of Molecular Liquids 2016, 218, 39-49

26) Campetella, M.; Bodo, E.; Caminiti, R.; Martino, A.; D'Apuzzo, F.; Lupi, S.; Gontrani, L., *Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions*, Journal of Chemical Physics 2015, 142, 234502

25) De Santis, S.; Masci, G.; Casciotta, F.; Caminiti, R.; Scarpellini, E.; Campetella, M.; Gontrani, L., *Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physico-chemical characterization*, Physical Chemistry Chemical Physics 2015, 17 (32), 20687-20698

24) Campetella, M.; Gontrani, L.; Leonelli, F.; Bencivenni, L.; Caminiti, R., *Two Different Models to Predict Ionic-Liquid Diffraction Patterns: Fixed-Charge versus Polarizable Potentials* Chemphyschem 2015, 16 (1), 197-203

23) Campetella, M.; De Santis, S.; Caminiti, R.; Ballirano, P.; Sadun, C.; Tanzi, L.; Gontrani, L., *Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?*, Rsc Advances 2015, 5 (63), 50938-50941

22) Bodo, E.; Mangialardo, S.; Capitani, F.; Gontrani, L.; Leonelli, F.; Postorino, P., *Interaction of a long alkyl chain protic ionic liquid and water*, Journal of Chemical Physics 2014, 140, 204503

21) Benedetto, A.; Bodo, E.; Gontrani, L.; Ballone, P.; Caminiti, R., *Amino Acid Anions in Organic Ionic Compounds. An ab Initio Study of Selected Ion Pairs*, Journal of Physical Chemistry B 2014, 118 (9), 2471-2486



- 20) Campetella, M.; Gontrani, L.; Bodo, E.; Ceccacci, F.; Cesare Marincola, F.; Caminiti, R., *Conformational isomerisms and nano-aggregation in substituted alkylammonium nitrates ionic liquids: An x-ray and computational study of 2-methoxyethylammonium nitrate*, Journal of Chemical Physics 2013, 138, 184506
- 19) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Materazzi, S.; Ceccacci, F.; Caminiti, R., *A Combined Theoretical and Experimental Study of Solid Octyl and Decylammonium Chlorides and of Their Aqueous Solutions*, Journal of Physical Chemistry B 2013, 117 (25), 7806-7818
- 18) Russina, O.; Triolo, A.; Gontrani, L.; Caminiti, R., *Mesoscopic Structural Heterogeneities in Room-Temperature Ionic Liquids*, Journal of Physical Chemistry Letters 2012, 3 (1), 27-33
- 17) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Caminiti, R., *Crystal Polymorphism of Hexylammonium Chloride and Structural Properties of Its Mixtures with Water*, Journal of Physical Chemistry B 2012, 116 (7), 2104-2113
- 16) Gontrani, L.; Bodo, E.; Triolo, A.; Leonelli, F.; D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Caminiti, R., *The Interpretation of Diffraction Patterns of Two Prototypical Protic Ionic Liquids: a Challenging Task for Classical Molecular Dynamics Simulations*, Journal of Physical Chemistry B 2012, 116 (43), 13024-13032
- 15) Cesare Marincola, F.; Piras, C.; Russina, O.; Gontrani, L.; Saba, G.; Lai, A., *NMR Investigation of Imidazolium-Based Ionic Liquids and Their Aqueous Mixtures*, Chemphyschem 2012, 13 (5), 1339-1346
- 14) Gontrani, L.; Caminiti, R., *The structure of liquid N-methyl pyrrolidone probed by x-ray scattering and molecular simulations*, Journal of Chemical Physics 2012, 136, 074505
- 13) Macchiagodena, M.; Ramondo, F.; Triolo, A.; Gontrani, L.; Caminiti, R., *Liquid Structure of 1-Ethyl-3-methylimidazolium Alkyl Sulfates by X-ray Scattering and Molecular Dynamics*, Journal of Physical Chemistry B 2012, 116 (45), 13448-13458
- 12) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Russina, O.; Caminiti, R., *Crystal Polymorphism of Propylammonium Chloride and Structural Properties of Its Mixture with Water*, Journal of Physical Chemistry B 2011, 115 (41), 11805-11815
- 11) Macchiagodena, M.; Gontrani, L.; Ramondo, F.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Liquid structure of 1-alkyl-3-methylimidazolium-hexafluorophosphates by wide angle x-ray and neutron scattering and molecular dynamics*, Journal of Chemical Physics 2011, 134 (11) 114521
- 10) Migliorati, V.; Ballirano, P.; Gontrani, L.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Thermal and Structural Properties of Ethylammonium Chloride and Its Mixture with Water*, Journal of Physical Chemistry B 2011, 115 (17), 4887-4899
- 9) Bodo, E.; Gontrani, L.; Caminiti, R.; Plechkova, N. V.; Seddon, K. R.; Triolo, A., *Structural Properties of 1-Alkyl-3-methylimidazolium Bis{(trifluoromethyl)sulfonyl}amide Ionic Liquids: X-ray Diffraction Data and Molecular Dynamics Simulations*, Journal of Physical Chemistry B 2010, 114 (49), 16398-16407
- 8) Bodo, E.; Gontrani, L.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Structural Determination of Ionic Liquids with Theoretical Methods: C(8)mimBr and C(8)mimCl. Strength and Weakness of Current Force Fields*, Journal of Physical Chemistry Letters 2010, 1 (7), 1095-1100
- 7) Russina, O.; Gontrani, L.; Fazio, B.; Lombardo, D.; Triolo, A.; Caminiti, R., *Selected chemical-physical properties and structural heterogeneities in 1-ethyl-3-methylimidazolium alkyl-sulfate room temperature ionic liquids*, Chemical Physics Letters 2010, 493 (4-6), 259-262
- 6) Russina, O.; Triolo, A.; Gontrani, L.; Caminiti, R.; Xiao, D.; Hines, L. G., Jr.; Bartsch, R. A.; Quitevis, E. L.; Plechkova, N.; Seddon, K. R., *Morphology and intermolecular dynamics of 1-alkyl-3-methylimidazolium bis{(trifluoromethane)sulfonyl}amide ionic liquids: structural and dynamic evidence of nanoscale segregation*, Journal of Physics-Condensed Matter 2009, 21 (42) 424121
- 5) Gontrani, L.; Russina, O.; Lo Celso, F.; Caminiti, R.; Annat, G.; Triolo, A., *Liquid Structure of Trihexyltetradecylphosphonium Chloride at Ambient Temperature: An X-ray Scattering and Simulation Study*, Journal of Physical Chemistry B 2009, 113 (27), 9235-9240
- 4) Gontrani, L.; Russina, O.; Cesare Marincola, F.; Caminiti, R., *An energy dispersive x-ray scattering and molecular dynamics study of liquid dimethyl carbonate*, Journal of Chemical Physics 2009, 131, 244503
- 3) Gontrani, L.; Ramondo, F.; Caracciolo, G.; Caminiti, R., *A study of cyclohexane, piperidine and morpholine with X-ray diffraction and molecular simulations*, Journal of Molecular Liquids 2008, 139 (1-3), 23-28
- 2) Gontrani, L.; Ramondo, F.; Caminiti, R., *Energy dispersive X-ray diffraction and molecular dynamics meet: the structure of liquid pyrrole*, Chemical Physics Letters 2006, 417 (1-3), 200-205



1) Gontrani, L.; Caminiti, R.; Bencivenni, L.; Sadun, C., *Molecular aggregation phenomena in solution: an energy dispersive X-ray diffraction study of concentrated imidazole water solutions*, Chemical Physics Letters 1999, 301 (1-2), 131-137

Delle pubblicazioni presentate, 29 sono coerenti con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

Una (la n.6) è classificata come: - PHYSICS, CONDENSED MATTER.

La Commissione all'unanimità dichiara tutte le pubblicazioni come **valutabili**.

La Commissione è stata in grado di valutare il contributo personale del candidato, anche sulla base delle competenze che caratterizzano la sua formazione scientifica.

Parametri bibliometrici

L'impatto della produzione scientifica presentata, è valutabile anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato (al 10/9/2016):

Numero totale di citazioni 830;

Numero medio di citazioni 27.67;

Impact factor totale 102.2;

Impact factor medio 3.41;

Numero lavori come Corresponding author 9;

Numero lavori come Primo Autore 7;

Numero lavori come Ultimo Autore 7;

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato presenta la lista della produzione complessiva pari a **N. 55 pubblicazioni** su riviste scientifiche con peer-review pubblicate nel periodo 1999-2016 (18 anni accademici), **N. 2 pubblicazioni** (con DOI) in corso di stampa corredata da Parametri bibliometrici relativi e **due capitoli** di un libro.

Parametri bibliometrici

L'impatto della produzione scientifica presentata, è valutabile anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici dichiarati (al 10/9/2016) **dal candidato** (Database SCOPUS/ISI WOS) e reperibili al:

URL:<http://www.researcherid.com/rid/L-6061-2014> (Researcher ID: L-6061-2014).

Numero totale di citazioni 1036;

Numero medio di citazioni 18.8;

Impact factor medio 3.16;

Hirsch (H) index 17;

Indice H normalizzato 1.22;

Indice Hirsch Contemporaneo (Hc) 14;

Numero lavori come Corresponding author 18;

Numero lavori come Primo Autore 10;

Numero lavori come Ultimo Autore 13.

**Candidata Larisa Lvova****VERIFICA TITOLI VALUTABILI**

La commissione ha preso in esame il curriculum ed i titoli presentati dal candidato ai fini della valutazione comparativa. Di seguito si riportano i dati più significativi della documentazione presentata.

1) **Laurea in Chimica** conseguito il 21/06/1996 presso Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia con votazione 110/110 e lode

2) **Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche** (vedi traduzione diploma) conseguito il 16/12/1999 presso Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia. Titolo della tesi: "The membranes of chemical sensors for analysis of multicomponent liquids".

3) **Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche** conseguito il 02/03/2012 presso Università degli studi di Roma "Tor Vergata", Roma, Italia. Titolo della tesi: "Porphyrin functionalities for chemical sensors development".

4) Abilitazione scientifica nazionale

Abilitata a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/B2 (Fondamenti chimici delle tecnologie).

5) Contratti di ricerca presso università in Italia e all'estero

a) Attività di ricerca (Post-Doc Fellow) presso Chemistry Department, Kwangwoon University, Seoul, Korea, 2000-2001.

b) Attività di consulenza scientifica presso BriSence R&D Company, Copenhagen, Denmark, 2001-2002.

c) Attività di ricerca presso Facoltà di Biologia (ricercatore a tempo determinato), Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia, 2002-2014.

d) Borsa di studio su un progetto Europeo "ELEN-TOOL", EU 5th framework program presso Università degli studi di Roma "Tor Vergata", novembre 2003- ottobre 2004.

e) Titolare di un Contratto di Collaborazione a Progetto Europeo "OMRISK", EU 6th framework program, 2005-2006, 2007-2008 presso Facoltà di Biologia, Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia.

f) Titolare di un **assegno di ricerca** a Progetto, finanziato da Filas S.p.A. su un progetto dal titolo "Development of an "Electronic Tongue" system for quality control of potable and waste water, acronimo LIQUID presso l'Università degli studi di Roma "Tor Vergata", Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche ed in collaborazione con Laboratorio dei Sensori Chimici del Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia, gennaio 2006- gennaio 2007 (**1 anno**).

g) **Assegno di ricerca** sul progetto "Acquasense" del programma MISE "Industria 2015", maggio 2012-ottobre 2014, marzo 2016-febbraio 2017 (**3 anni e 6 mesi**)

h) Attività di ricerca (ricercatore invitato) presso Federal State Budget Educational Institution of High Education "Saint-Petersburg State University of Information Technologies , Mechanics and Optics " (ITMO) come Invited researcher del programma del Ministero dell'Istruzione e della Scienza della Federazione Russa dal titolo "Development and application of artificial sensory systems, for a wide range of real problems", codice 713572-N, ottobre 2014 - ottobre 2017.

6) Riconoscimenti scientifici:

1996 Personal Award "Master project", Saint-Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

1998 Personal Award "Candidate project", Saint-Petersburg State University

2005 Personal Grant of St. Petersburg Administration for young Scientists.

-Membro del Editor board di Journal of Analytical Methods in Chemistry (ISSN: 2090-8865), Hindawi publishing

-Il Guest Editor di Special Issue of Sensors and Actuators B, Chemical volume 207B, 2015), dedicato al 80mo anniversario del Prof. Yu. Vlasov.

-Redattore principale (Main Editor) del libro "Multisensor Systems for Chemical Analysis - Materials and Sensors", Pan Stanford Publishing, L. Lvova, D. Kirsanov, A. Legin, C. Di Natale (Eds.), 420pp, ISBN9789814411158.

7) Seminari su invito

-2013 Invited seminar for MIT-Skoltech initiative at MIT (Massachusetts Institute of Technology)

-2014, 2015 Due seminari for "Saint-Petersburg State University of Information Technologies , Mechanics and Optics (ITMO)

-Invited symposia speaker and chairman ai congressi:

- 4th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, July 2- 7, 2006, Rome, Italy; 5th International

-Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, ICPP5, July 6- 11, 2008, Moscow, Russia

-Invited symposia speaker al 9th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, ICPP9, July 3-7, 2016, Nanjing, China



-Keynote speaker al Primo Convegno Nazionale Sensori, Rome, February 15-17, 2012

8)Partecipazione a convegni e workshop a larga maggioranza su tematiche riferite alla di sensoristica (24 Contributi orali elencati) nel periodo 1998-2016.

9)Progetti finanziati (partecipante o investigatore principale)

2012-2014 ACQUASENSE Made in Italy - Industria 2015

2005-2008 OMRISK EU 6th framework program (INCORUSSIA + NIS-1, Area D1)

2002-2004 ELEN-TOOL CRAFT QLK1-CT2002-71086,EU 5th framework program

2006-2007 LIQUID Finanziamento di fondiaria FILAS

11)Attività didattiche

a) Titolare del corso di insegnamento "Some aspects of physical chemistry", Laurea Magistrale in Chimica, Kwangwoon University, Seoul, South Korea, ottobre 2000-maggio 2001.

b) Professore a contratto per corsi integrativi del SSD 03/B1 (Stechiometria, Chimica Generale, Fondamenti di Chimica), Scienze MMFFNN e Ingegneria Università degli studi di Roma "Tor Vergata", per il periodo 2002-2015.

12)Supervisore Tesi

Correlatore per tesi di laurea triennale e magistrale in Chimica, Ingegneria Ambientale, Ingegneria Elettronica, Ingegneria Medica, 2004-2015, assistenza per studenti in tesi PhD.

TESI DI DOTTORATO

1)**Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche** 1999 conseguito presso Università Statale di San-Pietroburgo, San-Pietroburgo, Russia. Titolo della tesi: "The membranes of chemical sensors for analysis of multicomponent liquids".

2)**Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche** 2012 conseguito presso l'Università degli studi di Roma "Tor Vergata", Roma. Titolo della tesi: "Porphyrin functionalities for chemical sensors development".

Il lavoro svolto nelle due tesi di dottorato, riguarda la sensoristica e in prevalenza è coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/A1 CHIM/01.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

La candidata presenta 30 pubblicazioni (**25 articoli** su riviste scientifiche, con IF indicato e **5 capitoli di libro**), come da elenco:

1. S. S. Levitchev, A. L. Smimova, V. L. Khitrova, L. B. Lvova, A. V. Bratov Yu. G. Viasov, Photocurable carbonateselective membranes for chemical sensors containing lipophilic additives,

Sens. Act. B, 44 (1997) 397-401, **IF 4.75**

2. A. Legin, A. Smirnova, A. Rudnitskaya, L. Lvova, Yu. Vlasov, Chemical sensor array for multicomponent analysis of biological liquids,

Anal. Chim. Acta, 385 (1999) 131-135, **IF 4.71**

3. C. Di Natale, R. Paolesse, A. Macagnano, A. Mantini, A. D'Amico, A. Legin, L. Lvova, A. Rudnitskaya, Y. Vlasov; Electronic nose and electronic tongue integration for improved classification of clinical and food samples,

Sens. Act. B, 64 (2000) 15-21, **IF 4.75**

4. C. Di Natale, R. Paolesse, A. Macagnano, A. Mantini, A. D'Amico, M. Ubigli, A. Legin, L. Lvova, A. Rudnitskaya, Y. Vlasov, Application of a combined artificial olfaction and taste system to the quantification of relevant compounds in red wine,

Sens. Act. B 69 (2000) 342-347, **IF 4.75**

5. Y.S. Choi, L. Lvova, J. H. Shin, S. H. Oh, C. S. Lee, B. H. Kim, G. S. Cha, H. Nam, Determination of Oceanic Carbon Dioxide Using a Carbonate-Selective Electrode,

Anal. Chem 74 (2002) 2435-2440, **IF 5.88**

6. L. Lvova, S. S. Kim, A. Legin, Y. Vlasov, J. S. Yang, G. S. Cha, H. Nam, All-solid-state electronic tongue and its application for beverage analysis,

Anal. Chim. Acta 468 (2002) 303-314, **IF 4.71**

7. A. Legin, A. Rudnitskaya, L. Lvova, Yu. Vlasov, C. Di Natale, A. D'Amico, Evaluation of Italian wine by the electronic tongue: recognition, quantitative analysis and correlation with human sensory perception,

Anal. Chim. Acta, 484 (2003) 33-44, **IF 4.71**

8. L. Lvova, A. Legin, Yu. Vlasov, H. Nam, G.S. Cha, Multicomponent analysis of Korean green tea by means of disposable all-solid-state potentiometric electronic tongue microsystem,

Sens. Act B, 95 (2003) 391-399, **IF 4.75**

9. L. Lvova, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D'Amico, Detection of alcohols in beverages: an application of porphyrin-based Electronic tongue,



- Sens. Act B 118 (2006) 439-447, **IF 4.75**
10. L. Lvova, E. Martinelli, E. Mazzone, A. Pede, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D'Amico, Electronic Tongue based on an Array of Metallic Potentiometric Sensors, *Talanta*, 70 (2006) 833-839, **IF 4.03**
11. M.N. Ahmad, M.M.S. Yap, C.C. Cheen, A.K.M. Shafiqul Islam, Z. Ismail, M. Shurif, A.Y. Md. Shakaff, L. Lvova, Disposable array sensor strip for quantification of sinensetin in *Orthosiphon stamineus* benth samples, *Microchim. Acta* 163 (2008) 113-119, **IF 4.83**
12. R. Paolesse, L. Lvova, S. Nardis, C. Di Natale, A. D'Amico, Chemical Images by Porphyrin arrays of sensors, *Microchim. Acta* 163 (2008) 103-112, **IF 4.83**
13. L. Lvova, F. Dini, E. Martinelli, A. Bergamini, R. Paolesse, C. Di Natale, A. D'Amico, Clinical analysis of human urine by means of Electronic Tongue, *Talanta* 77 (2009) 1097-1104, **IF 4.03**
14. L. Tortora, M. Stefanelli, M. Mastroianni, L. Lvova, C. Di Natale, A. D'Amico, D. Filippini, I. Lundström, R. Paolesse, The hyphenated CSPT-potentiometric analytical system: An application for vegetable oil quality control, *Sens. Act B* 142 (2009) 457-463, **IF 4.75**
15. L. Lvova, G. Verrelli, M. Stefanelli, S. Nardis, C. Di Natale, A. D. Amico, S. Makarychev-Mikhailov, R. Paolesse, Platinum porphyrins as ionophores in polymeric membrane electrodes, *Analyst* 136 (2011) 4966 - 4976, **IF4.11**
16. L. Lvova, M. Mastroianni, C. Di Natale, I. Lundström, R. Paolesse, Towards hyphenated sensors development: design and application of porphyrin electropolymer materials, *Electroanalysis* 24 (2012) 776-789, **IF 2.47**
17. L. Lvova, S. Denis, A. Barra, P. Mielle, C. Salles, C. Vergoignan, C. Di Natale, R. Paolesse, P. Temple-Boyer, G. Feron, Salt release monitoring with specific sensors in "in vitro" oral and digestive environments from soft cheeses, *Talanta* 97 (2012) 171-180, **IF 4.03**
18. L. Lvova, M. Mastroianni, G. Pomarico, M. Santonico, G. Pennazza, C. Di Natale, R. Paolesse, A. D'Amico, Carbon Nanotubes Modified with Porphyrin Units for Chemical Sensing of Gaseous Phase, *Sens. Act. B* 170 (2012) 163-171, **IF 4.75**
19. L. Lvova, C. Di Natale, R. Paolesse, Porphyrin-based chemical sensors and multisensor arrays operating in the liquid phase, *Sens. Act. B*, 179 (2013) 21-31, **IF 4.75**
20. C. Bazzicalupi, C. Caltagirone, Z. Cao, Q. Chen, C. Di Natale, A. Garau, V. Lippolis, L. Lvova, H. Liu, I. Lundström, M. C. Mostallino, M. Nieddu, R. Paolesse, L. Prodi, M. Sgarzi, N. Zaccheroni, Multimodal use of new coumarinbased fluorescent chemosensors: towards highly selective optical sensors for Hg²⁺ probing, *Chem. Eur. J.* 19 (2013) 14639 - 14653, **IF 5.73**
21. F. Mandoj, S. Nardis, R. Pudi, L. Lvova, F. R. Fronczek, K. M. Smith, L. Prodi, D. Genovese, R. Paolesse, β -Pyrazino-fused tetraarylporphyrins, *Dyes and Pigments* 99 (2013) 136-143, **IF 4.01**
22. L. Lvova, R. Pudi, P. Galloni, V. Lippolis, C. Di Natale, I. Lundstrom, R. Paolesse, Multi-transduction sensing films for Electronic Tongue applications, *Sens. Act B* 207B (2015) 1076-1086, **IF 4.75**
23. Y. Sivalingam, R. Pudi, G. Pomarico, L. Lvova, G. Pomarico, F. Basoli, A. Catini, A. Legin, R. Paolesse, C. Di Natale, The light modulation of the interaction of l-cysteine with porphyrins coated ZnO nanorods, *Sens. Act B* 209 (2015) 613-621, **IF 4.75**
24. V. Panchuk, L. Lvova, D. Kirsanov, C. Guanais Goncalves, C. Di Natale, R. Paolesse, Extending electronic tongue calibration lifetime through mathematical drift correction: case study of microcystin toxicity analysis in waters, *Sens. Act B* 237 (2016) 962-968, **IF 4.75**
25. L. Lvova, C. Guanais Gonçalves, K. Petropoulos, L. Micheli, G. Volpe, D. Kirsanov, A. Legin, E. Viaggiu, R. Congestri, L. Guzzella, F. Pozzoni, G. Palleschi, C. Di Natale, R. Paolesse, Electronic tongue for microcystins screening in waters, *Biosens. Bioelectronics* 80 (2016) 154-160, **IF 7.47**
26. **BOOK CHAPTER:** L. Lvova, R. Paolesse, C. Di Natale, E. Martinelli, E. Mazzone, A. Orsini, A. D'Amico, Chemical images of liquids, in: Byrnes, Jim (Ed.), *Imaging for Detection and Identification*, NATO Science for Peace and Security Series, vol. VIII, Springer, 2007, 264 p, pp.63-95
27. **BOOK CHAPTER:** L. Lvova, A. D'Amico, A. Pede, C. Di Natale, R. Paolesse, Metallic sensors in multisensory analysis, in *Multisensor Systems for Chemical Analysis - Materials and Sensors*, Pan Stanford Publishing, L. Lvova, D. Kirsanov, A. Legin, C. Di Natale (Eds.) 2014, pp. 69-138, ISBN 9789814411158.



28. **BOOK CHAPTER:** Z. Cao, L. Lvova, R. Paolesse, C. Di Natale, I. Lundström, A. D'Amico, Porphyrin Electropolymers as Opto-electrochemical Probe for the Detection of Red-ox Analytes Sensors, Lecture Notes in Electrical Engineering, 162 (2014) 49-55.
29. **BOOK CHAPTER:** C. Guanais Branchini, L. Lvova, C. Di Natale, R. Paolesse, Wine and combined electronic nose and tongue, in "Electronic Nose and Tongue in Food Science", M.L. Rodriguez-Mendez Ed., ELSEVIER (Academic Press), 2016, p. 291-300.
30. **BOOK CHAPTER:** L. Lvova, Electronic tongue principles and applications in the food industry, in "Electronic Nose and Tongue in Food Science", M.L. Rodriguez-Mendez Ed., ELSEVIER Academic Press), 2016, p. 149-160.

La Commissione è stata in grado di valutare il contributo personale della candidata, anche sulla base delle competenze che caratterizzano la sua formazione scientifica.

Con riferimento alla coerenza con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02, le pubblicazioni N. 2,6,7;11,12;10,13,17;15;16 sono pubblicate su riviste pertinenti alla seguente classificazione: CHEMISTRY, ANALYTICAL.

La Commissione all'unanimità dichiara tutte le pubblicazioni come **valutabili**.

Parametri bibliometrici

La candidata presenta trenta lavori di cui 25 pubblicazioni su riviste scientifiche con peer-review e 5 capitoli di libro nel periodo 1997-2016, 18 anni accademici.

L'impatto della produzione scientifica presentata è valutabile anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici che la Commissione ha estratto (Data Base ISI-WOS) e reperibili al URL: <http://www.researcherid.com/rid/N-1129-2013>, ResearcherID: N-1129-2013.

Numero totale di citazioni 698

Impact Factor Totale 117.9

Numero Articoli come Primo Autore 10 e tre capitoli di libro

Numero Articoli come Autore Corrispondente 12

Un capitolo di libro come singolo autore.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Dagli atti risulta che la candidata non presenta una lista con la produzione complessiva delle sue pubblicazioni su riviste scientifiche. Nel CV dichiara di aver pubblicato **45** "papers International" e presenta un elenco di **5 capitoli** di libri pubblicati (inclusi nell'elenco dei 30) e **uno** "accepted".

Parametri bibliometrici dichiarati dalla candidata:

Dati bibliometrici (SCOPUS/ISI WOS)

Numero totale di citazioni 870;

Numero medio di citazioni $870/45=19.3$;

Impact factor totale 120;

Hirsch (H) index 15;

Indice H normalizzato $15/18=0.83$ (18 anni accademici);



Candidata Olga Russina

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

La commissione ha preso in esame il curriculum ed i titoli presentati dalla candidata ai fini della valutazione comparativa. Di seguito si riportano i dati più significativi della documentazione presentata dalla candidata.

1) **Diploma Laurea** in Fisica e Informatica Università "S. Seifullin" (Akmola, Kazakhstan) 1995 (dichiarato equipollente alla Laurea Magistrale in Fisica con votazione 110/110 con lode presso l'Università di Messina)

2) **Dottorato** in Scienze Naturali (Or. Rer. Nat.) su: "Indagine della dinamica microscopica nei pressi della transizione vetrosa" (dichiarato equipollente al titolo di Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali) Università Tecnica di Berlino 2004 e sua Dichiarazione di Valore rilasciata dall'Ambasciata Italiana in Germania

3) **Abilitazione** scientifica nazionale

Abilitato a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche)

4) **Contratti di ricerca** presso università in Italia e all'estero

– Assistente di ricerca - Istituto di Sicurezza Radiologica ed Ecologica - Centro Nazionale Ricerca Nucleare (Kurchatov, Kazakhstan) – 06/11/95-15/01/98

- Post-Doc research associate - Dip."Materiali e Strumentazione" - Helmholtz Zentrum -Post-Doc Research Berlin (D) - 01/01/04-30/11/05

- Assegno di ricerca Dip. Chimica - Univo Roma "Sapienza" (**sei anni**), per i seguenti periodi:

01/02/10-31/01/11, 01/06/11-31/05/12, 01/06/12-31/05/13, 01/06/13-31/05/14, 01/09/14-31/08/15, 01/09/15-31/08/16.

5) **Riconoscimenti scientifici**: Invited article, chair person, guest editor, nel periodo 2009-2016

Chair Person per la sessione "Ionic Liquids at Interfaces",

248th American Chemical Society Meeting, San Francisco (USA) 2014

Chair Person per la sessione "Polymer melts", 5° IDMRCS, Lille (FR) 2005

Articolo di Prospettive su invito sul Journal of Physical Chemistry Letters (JPCL, 3, 27 (2012))

Guest Editor - Special issue su J. Molecular Liquids su "Mesoscopic structure and dynamics in ionic liquids" 2015

Invited Articles

Contributo su invito per la special issue su "Ionic Liquids" su J. Phys.: Condensed Matter 2009

Contributo su invito per la special issue su "Ionic Liquids" su Chemical Communications 2012

Contributo su invito per la special issue su "Ionic Liquids" su J. Solution Chemistry 2015

6) **Partecipazioni a Congressi** internazionali – Invited Oral, Oral, Oral (coautore), Poster, nel periodo 2001-2016, su argomenti in larga parte correlati allo studio di ioni liquidi.

Dall'elenco delle partecipazioni risulta che ha effettuato 4 presentazioni su invito.

7) **Attività di Formazione** - Partecipazioni a scuole nazionali e internazionali

Workshop on Analysis of Diffraction Data in Real Space - ILL & ESRF (Grenoble, FR) 2011

Dinamica Molecolare Classica per la simulazione di sistemi biologici - CASPUR (Roma) 2011

Calcolo scientifico e Tecnico in linguaggio FORTRAN95 - CASPUR (Roma) 2011

8) **Organizzazione** di Grants per Attività Progettuale

a) come investigatore principale (PI)

2013 Progetto Scientifico: "Struttura e dinamica di sali liquidi fluorurati" (PI); Borsa per Assegno di Ricerca, Ateneo Università di Roma I

2012 Standard HPC Grant for RP "Rationalization of bulk performances of Alkali metal Oligoether Carboxylates" (PI) CASPUR

b) come investigatore partecipante

2010, 2011, 2013, 2014 Ateneo Università di Roma, Progetti annuali

PRIN 2009, "Struttura e dinamica di liquidi ionici e loro miscele"

c) **Organizzazione** e Partecipazione a Progetti presso:

- Large Scale Facilities: ILL, BENSC, Esrf, Periodo 2001-2016

- Helmholtz Zentrum Berlin – 2015

- Responsabile tecnico del Diffrattometro del Laboratorio di Nanotecnologie e Nanoscienze della Sapienza.

9) **Periodi di Allontanamento** non volontario dall'attività di ricerca.



A seguito di due figli nati in data 25.05.2006 e 17.01.2009, l'attività scientifica è stata ridotta.

10) **Altro.**

Tre lettere di presentazione: Prof. E. W. Castner (USA), Prof. A. Samanta (India), Prof. W. Schroer (Germania).

TESI DI DOTTORATO

Dottorato in Scienze Naturali (Or. Rer. Nat.) su: "Indagine della dinamica microscopica nei pressi della transizione vetrosa" (dichiarato equipollente al titolo di Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali) Università Tecnica di Berlino 2004 e sua Dichiarazione di Valore rilasciata dall'Ambasciata Italiana in Germania
Il lavoro di dottorato è coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

La candidata presenta 30 pubblicazioni, come da elenco, corredato da alcuni indicatori bibliometrici.

30. O. Russina, S. De Santis, L. Gontrani

Micro- and mesoscopic structural features of a bio-based choline-amino acid ionic liquid

RSC Advances 6, 34737 (2016)

29. F. Lo Celso, B. Aoun, A. Triolo, O. Russina

Liquid structure of dibutyl-sulfoxide.

Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 15980 (2016)

28. W. Schroer, A. Triolo, O. Russina

Nature of mesoscopic organization in protic ionic liquid-alcohol mixtures.

Journal of Physical Chemistry B 120, 2638-2643 (2016)

27. O. Russina, F. Lo Celso and A. Triolo

Pressure-responsive mesoscopic structure in room temperature ionic liquids.

Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 29496 (2015)

26. O. Russina, W. Schroer, and A. Triolo

Mesoscopic structural and dynamic organization in ionic liquids

J. of Molecular Liquids 210, 161 (2015)

25. L.M. Varela, T. Mendez-Morales, J. Carrete, V. Gomez-Gonzalez, B. Docampo-Alvarez, L.J. Gallego, O. Cabeza, O. Russina

Solvation of molecular cosolvents and inorganic salts in ionic liquids: A review of molecular dynamics simulations

J. Molecular Liquids 210, 178 (2015)

24. T. Mendez-Morales, J. Carrete, J. R. Rodriguez, O. Cabeza, L. J. Gallego, O. Russina, L.M. Varela

Nanostructure of mixtures of protic ionic liquids and lithium salts: effect of alkyl chain length

Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 5298 (2015)

23. O. Russina, R. Caminiti, T. Mendez-Morales, J. Carrete, O. Cabeza, L. J. Gallego, L.M. Varela, A. Triolo

How does lithium nitrate dissolve in a protic ionic liquid?

J. Molecular Liquids 205, 16 (2015)

22. O. Russina, A. Mariani, R. Caminiti, and A. Triolo

Structure of a binary mixture of ethylammonium nitrate and methanol.

J. Solution Chemistry 44, 669-685 (2015)

21. O. Russina, M. Macchiagodena, B. Kirchner, A. Mariani, B. Aoun, M. Russina, R. Caminiti and A. Triolo

Association in ethylammonium nitrate-dimethyl sulfoxide mixtures: first structural and dynamical evidences.

Journal of Non-Crystalline Solids 407, 333-338 (2015).

20. O. Russina, A. Sferrazza, R. Caminiti, and A. Triolo

Amphiphile Meets Amphiphile: Beyond the Polar-Apolar Dualism in Ionic Liquid/Alcohol Mixtures

J. Physical Chemistry Letters 5, 1738 (2014).

19. O. Russina, F. Lo Celso, M. Di Michiel, S. Passerini, G. B. Appetecchi, F. Castiglione, A. Mele, R. Caminiti, and A. Triolo

Mesoscopic structural organization in triphilic room temperature ionic liquids.

Faraday Discussions 167, 499 (2013)

18. M. A. A. Rocha, C. Neves, M. Freire, O. Russina, A. Triolo, J. A. P. Coutinho, and L. Santos

Alkylimidazolium Based Ionic Liquids: Impact of Cation Symmetry on their Nanoscale Structural Organization

J. Physical Chemistry B 117, 10889 (2013)



17. O. Russina, R. Caminiti, A. Triolo, S. Rajamani, B. Melai, A. Bertoli and C. Chiappe
Physico-chemical properties and nanoscale morphology in N-alkyl-N-methylmorpholinium dicyanamide room temperature ionic liquids
J. Molecular Liquids 187, 252 (2013)
16. A. Triolo, O. Russina, R. Caminiti, H. Shirota, H. Y. Lee, C. S. Santos, N. S. Murthy and E. W. Castner
Comparing intermediate range order for alkyl- vs. ether-substituted cations in ionic liquids.
Chemical Communications 48, 4959 (2012)
15. F. C. Marincola, C. Piras, O. Russina, L. Gontrani, G. Saba, A. Lai
NMR Investigation of Imidazolium-Based Ionic Liquids and Their Aqueous Mixtures
ChemPhysChem 13, 1339 (2012)
14. Russina O and Triolo A
New experimental evidence supporting the mesoscopic segregation model in room temperature ionic liquids
Faraday Discussions 154, 94 (2012)
13. Russina O, Triolo A, Gontrani L, Caminiti R
Mesoscopic Structural Heterogeneities in Room-Temperature Ionic Liquids
J. Phys. Chem. Lett., 3, 27 (2012)
12. Russina O, Fazio B, Schmidt C, Triolo A
Structural organisation and phase behaviour of 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate: an high pressure Raman spectroscopy study.
PCCP 13, 12067 (2011)
11. Zheng W, Mohammed A, Hines L.G, Xiao D, Martienes O.J, Bartsch R.A., Simon S.L, Russina O, Triolo A and Quitevis E.L
Effect of cation symmetry on the morphology and physicochemical properties of imidazolium ionic liquids.
J.Phys.Chem.B 114, 6572 (2011)
10. Russina O., Gontrani L., Fazio B., Lombardo D., Triolo A, Caminiti R
Selected chemical-physical properties and structural heterogeneities in 1-ethyl-3-methylimidazolium alkyl- sulfate room temperature ionic liquids.
Chem. Phys. Lett 493, 259 (2010)
9. O. Russina, A. Triolo, L. Gontrani, R. Caminiti, D. Xiao, L. G. Hines, Jr. R. A. Bartsch, E. L. Quitevis, N. Pletchkova, K. R. Seddon
Morphology and intermolecular dynamics of 1-alkyl-3-methylimidazolium bis((trifluoromethane)sulfonyl)amide ionic liquids.
J. Phys.: Cond. Matt. 21 424121 (2009)
8. O. Russina, A. Triolo, M. Beiner, C. Pappas, V. Arrighi, M. Russina, T. Unruh, C. L. Mullan, C. Hardacre
Temperature dependence of the primary relaxation in 1-hexyl,3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide.
J. Phys. Chem. B 113, 8469 (2009)
7. D. Xiao, L. G. Hines, S. Li, R. A. Bartsch, E. L. Quitevis, O. Russina, A. Triolo
Effect of cation symmetry and alkyl chain length on the structure and intermolecular dynamics of 1,3-dialkylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide ionic liquids
J. Phys. Chem. B 113, 6426 (2009)
6. A. Triolo, O. Russina, B. Fazio, G. B. Appetecchi, M. Carewska, S. Passerini
Nanoscale organization in piperidinium based room temperature ionic liquids
J. Chem. Phys. 130, 164521 (2009)
5. A. Triolo, O. Russina, B. Fazio, R. Triolo, E. Di Cola
Morphology of 1-alkyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate room temperature ionic liquids.
Chemical Physics Letters 457, 362 (2008)
4. A. Triolo, O. Russina, H.-J. Bleif and E. Di Cola
Nanoscale segregation in room temperature ionic liquids
Journal of Physical Chemistry B 111, 4641 (2007)



3. A. Triolo, A. Mandanici, O. Russina, V. Rodriguez-Mora, M. Cutroni, C. Hardacre, M. Nieuwenhuyzen, H.-J. Bleif, L. Keller and M. A. Ramos

Thermodynamics, structure and dynamics in room temperature ionic liquids: the case of 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate ([bmim][PF6])

Journal of Physical Chemistry B 110, 21357-21364 (2006)

2. O. Russina, A. Triolo, Y. Aihara, M. T. F. Telling and H. Grimm

Quasi elastic neutron scattering investigation of dynamics in polymer electrolytes

Macromolecules 37, 8653 (2004)

1.O. Russina, M. Russina, F. Mezei, R. Lechner, J. Pieper, A. Desmedt

Dynamic correlations around the glass transition in systems with different degrees of fragility

Applied Physics A 74, 1192 (2002)

La Commissione è stata in grado di valutare il contributo personale della candidata, anche sulla base delle competenze che caratterizzano la sua formazione scientifica.

Delle pubblicazioni presentate, 27 sono coerenti con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

Tre sono classificate come: la n.2 - Macromolecules: Polymer Science, la n.1-Physics Applied, MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY e la n. 9 - PHYSICS, CONDENSED MATTER.

La Commissione all'unanimità dichiara tutte le pubblicazioni come **valutabili**.

Parametri bibliometrici

L'impatto della produzione scientifica presentata, è valutabile anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici dichiarati dalla candidata (al 7/9/2016):

Numero totale di citazioni 2012

Numero medio di citazioni per pubblicazione 67.1

Impact Factor Totale 107.13

Impact Factor medio per pubblicazione 3.57

Numero Articoli come Primo Autore 17

Numero Articoli come Ultimo Autore 3

Numero Articoli come Autore Corrispondente 12

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La candidata presenta la lista della produzione complessiva pari a **N. 40 pubblicazioni** su riviste scientifiche con peer-review e **un capitolo** di libro, pubblicati nel periodo 2002-2016 (14 anni avendo considerato i due periodi di maternità), corredata da Parametri bibliometrici relativi.

Parametri bibliometrici

L'impatto della produzione scientifica presentata, è valutabile anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici dichiarati (al 7/9/2016) dalla candidata (Data Base ISI-WOS) e reperibili al <http://www.researcherid.com/rid/G-9780-2012> (Researcher ID:G-9780-2012).

Numero totale citazioni 2344

Numero Citazioni Medio per pubblicazione 58.6

Impact Factor Totale 136.5

Hirsch (H) index 21.



Candidato Francesco Sebastianelli
VERIFICA TITOLI VALUTABILI

La commissione ha preso in esame il curriculum ed i titoli presentati dal candidato ai fini della valutazione comparativa. Di seguito si riportano i dati più significativi della documentazione presentata dal candidato.

1) **Laurea in Chimica**, Roma, Università degli Studi di Roma “La Sapienza”, conseguito in data 13/04/2000

2) **Dottore di ricerca in Scienze Chimiche**, Roma, Università degli studi di Roma “La Sapienza”, conseguito il 19/01/2004; Titolo della tesi: ‘Structures and interactions in Rare gas clusters with ionic impurities: classical and quantum methods’

3) **Abilitazione scientifica nazionale**

Abilitato a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche).

4) **Contratti di ricerca** presso università in Italia e all'estero.

-Contratto di collaborazione coordinata e continuativa per il progetto di ricerca “Strutture di cluster con impurezze ioniche” presso il gruppo di Chimica Fisica Teorica diretto dal prof. F.A. Gianturco, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma “La Sapienza” (Dicembre 2003-Settembre 2004).

-Borsa di studio postdottorale nel gruppo di chimica fisica del professor Zlatko Bačić, New York University, New York, USA, per lo studio di cluster di idrogeno con impurezze neutre e analisi energetica e strutturale di idrogeno molecolare in clathrate hydrate (gas storage) con metodi Montecarlo quantistici. Settembre 2004-maggio 2007 (2anni e 9 mesi).

-Contratto di collaborazione coordinata e continuativa presso il gruppo di Chimica Fisica Teorica diretto dal prof. F.A. Gianturco, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma “La Sapienza” per il progetto di ricerca “Scattering di elettroni su molecole di interesse biologico”. Il contratto copre il periodo 1/6/2007 – 31/12/2008.

-Borsa di studio presso il centro di calcolo interuniversitario CASPUR per una collaborazione con il Dip.to di Chimica dell'Università “La Sapienza” per lo studio del trattamento della dinamica del *radiation damage* in biosistemi. Il contratto copre il periodo 1/2/2009 – 1/2/2011 (2 anni).

-Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università “Sapienza” di Roma dal titolo “Sistemi energetici innovativi finalizzati all'utilizzo delle FER”. Dal 1 febbraio 2012 al 31 gennaio 2015 (**3 anni**). Tematica: modellizzazione per il riconoscimento di sorgenti di inquinamento atmosferico con metodi di algoritmi genetici.

5) **Riconoscimenti scientifici:**

-Premio di laurea “G. Stampacchia” (anno 2002) destinato alla prima opera pubblicata da un laureato in Chimica, Roma, Università degli Studi di Roma “La Sapienza”.

6) Partecipazioni come relatore a conferenze internazionali (invited speaker)

-*Dynamics evolution of core formation in small Rare gas clusters with ionic impurities*, ISAAC 2003, S.Petersburg, Russia.

-*HF and CO in clusters of hydrogen: Size evolution of structural, energetic and dynamical aspects of quantum solvation*, PACIFICHEM 2005, Honolulu, Hawaii, USA.

-*Dynamical role of metastable anions from carbon-rich molecules in planetary atmospheres*, DySoN 2010, Rome, Italy.

7) Partecipazioni ad altro titolo a scuole e conferenze nazionali e internazionali

Riunione Scientifica del programma di Ricerche Cofinanziate MURST 2000-2002, Rome, Italy
Università “La Sapienza”, 27-28 June 2001 (presentazione orale).

Charles Coulson Summer School in Theoretical Chemistry, Oxford, UK 08-16 September 1996.

Gaussian Workshop, Caspur, Rome, Italy 21-24 April 1998.

European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP) VI, Siena, Italy 14-18 July 1998 (con presentazione di un poster).

1st European School of Computational Chemistry on Reaction and Molecular Dynamics, Perugia, Italy 27 June – 01 July 1999 (con presentazione di un poster).

Euro Summer School on Dynamics of Molecular Collision relevant to the evolution of interstellar



matter, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel 11-15 September 2000.
European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC 2000), Jerusalem, Israel 17-22 September 2000 (con presentazione di un poster).
European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP VII), Berlin, Germany 02-06 April 2001 (con presentazione di un poster).
Euro Winter School on Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: from Theory to Algorithms, Kerkrade, Netherlands 25 February – 01 March 2002 (con presentazione di un poster).
Corso di Fortran90 per il calcolo scientifico intensivo, CILEA di Milan, Italy 05-07 March 2002.
Istituto Nazionale di Fisica della Materia (INFN) Meeting, Bari, Italy 24-28/07/2002 (con presentazione di un poster).
European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XIV), Istanbul, Turkey 01-06 September 2002 (con presentazione di un poster).
Electron Controlled Chemical Lithography (ECCL08), Lisbon, Portugal 12-16 March 2008 (con presentazione di un poster).
Control of Molecular Processes (CMP08), Roma 2-4 November 2008 (con presentazione di un poster).
Chemical Control with Electrons and Protons (ESF-FWF Conference), Obergugl, Austria 22-27 November 2008 (con presentazione di un poster).

9) Attività didattica

Cultore della materia presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "Sapienza".
Esercitazioni per i corsi di *Chimica Fisica* e *Meccanica Quantistica* presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "Sapienza".

TESI DI DOTTORATO

Dottorato in Scienze Chimiche, Roma, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", conseguito il 19/01/2004.
Titolo: "Structures and interactions in Rare gas clusters with ionic impurities: classical and quantum methods".
Il lavoro di dottorato è coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

Il candidato presenta 30 pubblicazioni, come da elenco:

- F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and E. Yurtsever
Finding the global minima of $(\text{Ne})_{n+}$ clusters with non-empirical models: a comparison of results
Chemical Physics **290** 279-295 (2003).
- F. Sebastianelli**, I. Baccarelli, C. Di Paola and F.A. Gianturco
Structural and quantum effects from anionic centers in rare gas clusters: the $(\text{Ne})_n\text{H}^-$ and $(\text{Ne})_{n+1}$ Systems
Journal of Chemical Physics **119** 5570-5582 (2003).
- F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco
Attachment and solvation of the H-dopant: structures of Ne_nH^- and Ar_nH^- clusters from energy optimizing calculations
Journal of Physical Chemistry A **108** 8633-8640 (2004).
- E. Bodo, **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and I. Pino
Microsolvation of LiH^+ in helium clusters: many-body effects and additivity models for the interaction forces
Journal of Physical Chemistry A **109** 4252-4260 (2005).
- F. Sebastianelli**, E. Bodo, I. Baccarelli, C. Di Paola, F.A. Gianturco and M. Yurtsever
Microsolvation of Li^+ in bosonic helium clusters. I. Many-body effects on the structures of the small aggregates
Computational Materials Science **35** 261-267 (2006).
- F. Sebastianelli**, Y.S. Elmatad, H. Jiang and Z. Bačić
 HF in clusters of molecular hydrogen: II. Quantum solvation by H_2 isotopomers, cluster rigidity, and comparison with CO-doped parahydrogen clusters
Journal of Chemical Physics **125** art. n. 164313, pp. 1-10 (2006).



7. M. Xu, Y.S. Elmatad, **F. Sebastianelli**, J.W. Moskowitz and Z. Bačić
Hydrogen molecule in the small dodecahedral cage of a clathrate hydrate: quantum five-dimensional calculations of the coupled translation-rotation eigenstates
Journal of Physical Chemistry B **110** 24806-24811 (2006).
8. **F. Sebastianelli**, M. Xu, Y.S. Elmatad, J.W. Moskowitz and Z. Bačić
Hydrogen molecules in the small dodecahedral cage of a clathrate hydrate: quantum translationrotation dynamics of the confined molecules
Journal of Physical Chemistry C **111** 2497-2504 (2007).
9. **F. Sebastianelli**, M. Xu, D.K. Kanan and Z. Bačić
One and two hydrogen molecules in the large cage of the structure II clathrate hydrate: quantum translation-rotation dynamics close to the cage wall
Journal of Physical Chemistry A **111** 6115-6121 (2007).
10. M. Xu, **F. Sebastianelli** and Z. Bačić
Hydrogen molecule in the small dodecahedral cage of a clathrate hydrate: quantum translationrotation dynamics at higher excitation energies
Journal of Physical Chemistry A **111** 12763-12771 (2007).
11. M. Xu, **F. Sebastianelli**, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
Quantum dynamics of coupled translational and rotational motions of H₂ inside C₆₀
Journal of Chemical Physics **128** art. n. 011101, pp. 1-4 (2008).
12. F.A. Gianturco, **F. Sebastianelli**, R.R. Lucchese, I. Baccarelli and N. Sanna
Ring-breaking electron attachment to uracil: following bond dissociations via evolving resonances
Journal of Chemical Physics **128** art. n. 174302, pp. 1-8 (2008).
13. M. Xu, **F. Sebastianelli** and Z. Bačić
Quantum dynamics of H₂, D₂, and HD in the small dodecahedral cage of clathrate hydrate: evaluating H₂-water nanocage interaction potentials by comparison of theory with inelastic neutron scattering experiments
Journal of Chemical Physics **128** art. n. 244715, pp. 1-13 (2008).
14. M. Xu, **F. Sebastianelli**, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
H₂, HD, and D₂ inside C₆₀: coupled translational-rotational eigenstates of the endohedral molecules from quantum five-dimensional calculations
Journal of Chemical Physics **129** art. n. 064313, pp. 1-9 (2008).
15. **F. Sebastianelli**, M. Xu and Z. Bačić
Quantum dynamics of small H₂ and D₂ clusters in the large cage of structure II clathrate hydrate: energetics, occupancy, and vibrationally averaged cluster structures
Journal of Chemical Physics **129** art. n. 244706, pp. 1-9 (2008).
16. I. Baccarelli, **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and N. Sanna
Modelling dissociative dynamics of biosystems after metastable electron attachment: the sugar backbones
European Physical Journal D **51** 131-136 (2009).
17. M. Xu, **F. Sebastianelli**, B.R. Gibbons, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
Coupled translation-rotation eigenstates of H₂ in C₆₀ and C₇₀ on the spectroscopically optimized interaction potential: effects of cage anisotropy on the energy level structure and assignments
Journal of Chemical Physics **130** art. n. 224306, pp. 1-14 (2009).
18. M. Xu, **F. Sebastianelli** and Z. Bačić
Coupled translation-rotation eigenstates of H₂, HD, and D₂ in the large cage of structure II clathrate hydrate: comparison with the small cage and rotational Raman Spectroscopy
Journal of Physical Chemistry A **113** 7601-7609 (2009).
19. **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco, T. Stoecklin and I. Baccarelli
Scattering of electrons by gaseous CS(1): the role of short-range forces on the very-low energy 2 resonance
Chemical Physics Letters **476** 182-185 (2009).



20. **F. Sebastianelli**, M. Xu, Z. Bačić, R. Lawler and N.J. Turro
Hydrogen molecules inside fullerene C₇₀: quantum dynamics, energetics, maximum occupancy, and comparison with C₆₀
Journal of the American Chemical Society **132** 9826-9832 (2010).
21. **F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco
Stabilizing dicyanoacetylene anions in planetary atmospheres: quantum dynamics of its transient negative ions
European Physical Journal D **59** 389-398 (2010).
22. A. Witt, **F. Sebastianelli**, M.E. Tuckerman and Z. Bačić
Path integral molecular dynamics study of small H₂ clusters in the large cage of structure II clathrate hydrate: temperature dependence of quantum spatial distributions
Journal of Physical Chemistry C **114** 20775-20782 (2010).
23. **F. Sebastianelli**, F. Carelli and F.A. Gianturco
Modeling chemical evolution in a cold molecular plasma: quantum dynamics of the CF₂-intermediates after electron attachment
Journal of Physical Chemistry A **115** 11531-11543 (2011).
24. **F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco
Metastable anions of polyynes: Dynamics of fragmentation/stabilization in planetary atmospheres after electron attachment
European Physical Journal D **66** art. n. 41, pp. 1-9 (2012).
25. **F. Sebastianelli**, F. Carelli and F.A. Gianturco
Forming (NCCN)-by quantum scattering: a modeling for Titan's atmosphere
Chemical Physics **398** 199-205 (2012).
26. F. Carelli, T. Grassi, **F. Sebastianelli** and F.A. Gianturco
Electron-attachment rates for carbon-rich molecules in protoplanetary atmospheres: the role of chemical differences
Monthly Notice of the Royal Astronomical Society **428** 1181-1184 (2013).
27. I. Baccarelli, **F. Sebastianelli**, B.M. Nestmann and F.A. Gianturco
Forming metastable carbon-rich anions in planetary atmospheres: the case of diacetylene
European Physical Journal D **67** art. n. 93, pp. 1-8 (2013).
28. A.G. Sanz, M.C. Fuss, F. Blanco, F. Carelli, **F. Sebastianelli**, F.A. Gianturco and G. Garcia
Electron scattering cross sections from anthracene over a broad energy range (0.00001-10,000 eV)
Applied Radiation and Isotopes **83** 68-76 (2014).
29. F. Carelli, F.A. Gianturco, M. Satta, **F. Sebastianelli**
Attaching electrons to a 3-ring acene: Structures and dynamics of anions in gas-phase anthracene
International Journal of Mass Spectrometry **365-366** 377-383 (2014).
30. A. Cantelli, F. D'Orta, A. Cattini, **F. Sebastianelli**, L. Cedola
Application of genetic algorithm for the simultaneous identification of atmospheric pollution sources
Atmospheric Environment **115**, 36-46 (2015).

Il candidato non dichiara alcun Parametro bibliometrico.

Per trenta lavori presentati (periodo 2003-2015), la Commissione è stata in grado di valutare il contributo personale del candidato, anche sulla base delle competenze che caratterizzano la sua formazione scientifica.

Delle pubblicazioni presentate, 27 sono coerenti con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

Tre sono classificati come:

n.26 ASTRONOMY & ASTROPHYSICS;

n.28 CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR; NUCLEAR SCIENCE & TECHNOLOGY

n.30 ENVIRONMENTAL SCIENCES ; METEOROLOGY & ATMOSPHERIC SCIENCES

La Commissione all'unanimità dichiara tutte le pubblicazioni come **valutabili**.

Parametri bibliometrici



La produzione scientifica è valutabile anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici che la Commissione ha estratto (Data Base ISI-WOS) e reperibili al URL: <http://www.researcherid.com/rid/B-5718-2014> (ResearcherID: B-5718-2014)

Numero totale di citazioni 569

Impact Factor Totale 89.7

Numero Articoli come Autore Corrispondente 3

Numero Articoli come Primo Autore 14

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato presenta una produzione complessiva pari a N. 50 pubblicazioni su riviste scientifiche con peer-review pubblicate nel periodo 2000-2015 (17 anni accademici) e 2 capitoli di libri.

Parametri bibliometrici (al 11/9/2016) dichiarati dal candidato:

Numero totale di citazioni 749,

Numero medio di citazioni 15,

Hirsch (H) index 17

PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B 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.R. N. 1900/2016 DEL 03.08.2016.

(Codice Concorso 2016RTDB010, pubblicato sulla Gazzetta Ufficiale – IV serie speciale n. 64 del 12.08.2016)

ALLEGATO E AL VERBALE N. 3

GIUDIZI INDIVIDUALI E COLLEGIALI SU TITOLI E PUBBLICAZIONI

Candidato Lorenzo Gontrani

COMMISSARIO N.V. Pavel

Valutazione sui titoli

Il Candidato Lorenzo Gontrani si è laureato in Chimica e ha ottenuto il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (quindi coerente con il presente bando), presso l'Università di Pisa (2002).

Ha ottenuto l'abilitazione a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

Il candidato possiede **un'ottima esperienza scientifica**, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2, maturata presso noti gruppi di ricerca italiani, dove ha svolto attività di ricerca come partecipante a diversi progetti. La sua attività è stata riconosciuta a livello internazionale nel campo delle ricerche sui liquidi ionici, come coeditore di un libro.

Ha svolto attività didattica coerente con quella richiesta nel profilo del Bando di Concorso.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Il candidato, con un'età accademica di 18 anni (1999-2016) possiede un'ottima esperienza scientifica. Delle pubblicazioni presentate, 29 sono coerenti con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

Una (la n.6), come tema di ricerca, è coerente con la Chimica Fisica.

L'attività di ricerca principale riguarda lo studio teorico e computazionale mediante metodologie simulate, di sistemi liquidi come liquidi molecolari, ionici e loro miscele.

Tali studi sono combinati con l'uso di tecniche sperimentali come diffrazione di raggi X in dispersione di energia (EDXD), diffrazione di neutroni, spettroscopia vibrazionale. La simbiosi tra metodi computazionali e tecniche sperimentali si è rivelata particolarmente efficace per ottenere informazioni dettagliate sulla strutturazione micro- e



mesoscopica dei sistemi studiati. Le tecniche di calcolo applicate sono frutto di una lunga esperienza nel campo della chimica computazionale applicata allo studio di molecole in soluzione.

La produzione e l'esperienza scientifica maturate sono perfettamente aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando (*"Attività di ricerca prevista: Caratterizzazione mediante Diffrazione di raggi X e metodi teorici di Dinamica Molecolare di Liquidi Ionici e Molecolari"*).

La produzione scientifica del candidato, **di ottimo livello**, nel contesto internazionale di riferimento, risulta ottima per rigore metodologico, originalità e qualità, anche in relazione ai principali indicatori bibliometrici, in particolare, citazioni (830), numero medio di citazioni (27.7), IF totale (102.2), Autore corrispondente (9/30), Primo autore (9/30).

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Valutazione sulla produzione complessiva

La produzione scientifica complessiva del candidato (**N. 55 lavori** su riviste scientifiche con peer-review e **due capitoli** di libro, pubblicati nel periodo 1999-2016), risulta in continuo incremento della produttività negli ultimi dieci anni ed è **di ottimo livello qualitativo e quantitativo**. I parametri bibliometrici (citazioni, IFTotale, Hindex) sono allineati con quelli delle 30 pubblicazioni presentate e dimostrano quindi una produzione complessiva di **ottima qualità**.

Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, di formazione e sulla qualità della produzione scientifica è **pertanto ottimo e chiaramente coerente** con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

COMMISSARIO Eugenio Caponetti

L'attività di formazione di Luca Gontrani è arricchita dalla partecipazione a numerose scuole sia nazionali che internazionali. Il candidato ha un'ottima esperienza scientifica documentata anche da soggiorni presso vari centri di ricerca. Ha Partecipato a numerosi congressi nazionali ed internazionali e a diverse attività progettuali alcune delle quali riguardano progetti su liquidi ionici.

L'attività di ricerca del candidato consiste nello studio teorico e computazionale di liquidi ionici, liquidi molecolari e loro miscele. Ha utilizzato tecniche sperimentali, quali diffrazione di raggi X in dispersione di energia (EDXD) e di neutroni e metodi di simulazione, quali Dinamica Molecolare, Calcoli Ab initio e Molecular Modeling. La complementarità tra tecniche sperimentali e metodi di simulazione ha permesso di ottenere informazioni sulla struttura dei sistemi analizzati.

Le 30 pubblicazioni indicate dal candidato per la valutazione comparativa, di **eccellente livello** è inserita nel contesto internazionale di riferimento ed è valutabile come ottima per rigore metodologico, originalità e qualità, anche in relazione ai principali indicatori bibliometrici. Il contributo individuale del candidato, attestato dalla presenza come primo, ultimo e autore corrispondente in molte delle pubblicazioni è notevole.

Il giudizio complessivo sulla qualità della produzione scientifica è pertanto **ottimo** e chiaramente coerente con il Settore Concorsuale 03/A2 ed il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

La consistenza della produzione scientifica complessiva è attestata da oltre 55 pubblicazioni e l'attività di formazione scientifica e didattica sono completamente coerenti con le tematiche del SSD CHIM/02 e con l'attività di ricerca richiesta dal bando di concorso.

La positività del giudizio è confermata dall'aver conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

COMMISSARIO Anna Maria Musinu

Valutazione sui titoli

Il candidato Luca Gontrani è attualmente assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica Università degli Studi di ROMA "La Sapienza". Si è laureato in Chimica (1998) presso l'Università di Roma La Sapienza e ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (2002) presso l'Università di Pisa, con una tesi riguardante lo "Studio delle proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico con metodi teorico-computazionali. Esempi di applicazioni di metodi teorici di vario tipo e sofisticazione allo studio di sistemi biologici di differente complessità", coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02. Ha conseguito l'Abilitazione scientifica nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.



Il candidato ha un'ottima esperienza scientifica: è stato Ricercatore presso il Colosseum Combinatorial Centre for Technology (Rome) – Biotech MIUR startup dal 2002 al 2006, Borsista presso Italian Supercomputing Centre (CASPUR) dal 2006 al 2007, Borsista (FIRB) National Research Council, Structure of Matter Department dal 2011 al 2014 e Assegnista di ricerca per complessivi 4 anni, a partire dal 2007, presso il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Cagliari e presso il Dipartimento di Scienze della Terra e il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza" dove prosegue la sua attività fino al 31/01/2017. Ha partecipato ad attività Progettuali 2009 (PRIN –MIUR) e 2011-2014 FIRB "Structure and dynamics of ionic liquids" e ottenuto Grants come investigatore principale: 2009-2012 Caspur grants (tempo di calcolo per 4 progetti su liquidi ionici). Ha Partecipato a Congressi nazionali ed internazionali come si evince dall'elenco di 18 contributi, orali o poster, nel periodo 2006-2016, 10 dei quali come autore principale, su argomenti correlati con lo studio di liquidi ionici. Svolge attività di reviewer per diverse riviste, attinenti al settore concorsuale 03/A2.

La sua attività di Formazione include la partecipazione a 6 scuole nazionali e 4 internazionali.

L'attività scientifica del candidato riguarda prevalentemente lo studio teorico e computazionale di sistemi liquidi, comprendenti liquidi molecolari, ionici e loro miscele, mediante tecniche sperimentali, quali diffrazione di raggi X in dispersione di energia (EDXD) e di neutroni e metodi di simulazione, quali Dinamica Molecolare, Calcoli Ab initio e Molecular Modeling. La sinergia tra tecniche sperimentali e metodi di simulazione si è rivelata particolarmente efficace per ottenere informazioni dettagliate sulla struttura micro- e meso-scopica di sistemi complessi ed è **completamente coerente** con l'attività di ricerca richiesta dal bando di concorso.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Il candidato presenta 30 pubblicazioni, corredate da alcuni indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS). Da questa documentazione si evince chiaramente la coerenza con le tematiche del SSD CHIM/02 ed il contributo individuale del candidato, presente come primo o ultimo autore (14) e autore corrispondente (10 pubblicazioni). L'impatto della produzione scientifica presentata, è **ottimo** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato: numero totale di citazioni 830 e Impact factor totale 102.

Valutazione sulla produzione complessiva

La consistenza complessiva della produzione scientifica è attestata dalle 55 pubblicazioni (Database SCOPUS/ISI WOS) e da due capitoli di libri di uno dei quali il candidato è anche coeditore. Il Candidato dimostra **una notevole autonomia** risultando autore corrispondente per 18 pubblicazioni e primo o ultimo autore per 23 pubblicazioni e con un h-index = 17, H-index contemporaneo (Hc) 14, numero totale di citazioni=1036 e IF totale = 174.

L'attività didattica è coerente con quella richiesta nel profilo del Bando di Concorso e riguarda lezioni teoriche e pratiche per un corso di Chimica Computazionale /Chimica Fisica III – Diffrazione di raggi X – Dipartimento di Chimica – Università di Roma La Sapienza aa. 2011-2015 e Lezioni teoriche e pratiche per un corso di Chimica Computazionale (2002).

Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, di formazione e didattica, e sulla qualità della produzione scientifica è **pertanto ottimo e chiaramente coerente** con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

Candidata Larisa Lvova

COMMISSARIO N.V. Pavel

Valutazione sui titoli

La candidata Larisa Lvova si è laureata in Chimica nel 1996 e ha conseguito due dottorati in Scienze Chimiche, il primo nel 1999 presso l'Università Statale di San-Pietroburgo, il secondo nel 2012, presso l'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata", Roma. Gli argomenti delle due tesi riguardano lo studio di sensori chimici, settore di ricerca prevalentemente classificato come appartenente alla Chimica Analitica.

Ha ottenuto l'abilitazione a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/B2 (Fondamenti chimici delle tecnologie).

Ha svolto attività didattica, in prevalenza, come professore a contratto per corsi integrativi del SSD 03/B1 e B2, nel periodo 2002-2015.



Ha svolto attività di ricerca in diversi progetti e i risultati della sua attività sono stati apprezzati a livello internazionale, come si evince dai riconoscimenti scientifici (partecipazioni a congressi su invito e redattore del libro “Multisensor Systems for Chemical Analysis - Materials and Sensors”).

La candidata possiede un'eccellente esperienza scientifica, maturata anche nel corso di esperienze all'estero, nel campo della Chimica Analitica - sensoristica applicata (naso elettronico) alla determinazione di diversi analiti.

La candidata con un'età accademica di 18 anni possiede, anche in considerazione dell'età accademica, un'ottima esperienza scientifica.

L'attività di ricerca della candidata è dedicata fundamentalmente allo sviluppo di sensori chimici e biosensori. A tale scopo la candidata ha affrontato le varie problematiche incontrate, dalla sintesi e la caratterizzazione di nuovi ligandi e materiali nano compositi, alle loro specifiche proprietà di trasduzione. Il passo successivo è stato quello di realizzare sistemi multisensoriali di analisi (naso elettronico) che hanno trovato impieghi nel monitoraggio ecologico, nell'analisi di bevande e cibo, di campioni biologici e analisi clinica.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Larga parte delle pubblicazioni presentate sono coerenti con il settore concorsuale 03/A1 – Chimica Analitica. La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono poco aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando (“**Attività di ricerca prevista:** Caratterizzazione mediante Diffrazione di raggi X e metodi teorici di Dinamica Molecolare di Liquidi Ionici e Molecolari”).

La produzione scientifica presentata dalla candidata è di buon livello qualitativo. Nel contesto internazionale essa risulta molto buona per rigore metodologico, originalità e qualità, e ha ottenuto una buona visibilità dal punto di vista dei principali indicatori bibliometrici, in particolare citazioni (698), IF totale (117.9), Autore corrispondente (12/25), Primo autore (10/25).

Valutazione sulla produzione complessiva

La produzione scientifica complessiva della candidata (**N. 45 pubblicazioni** su riviste scientifiche con peer-review e **5 capitoli** di libro pubblicati in 18 anni di carriera accademica) è continua nel tempo e di discreto livello quantitativo.

I parametri bibliometrici (citazioni, IF Totale, Hindex), dimostrano una produzione complessivamente di buona qualità, anche se poco aderente alle tematiche del SSD 03/A2 del bando in epigrafe.

COMMISSARIO Eugenio Caponetti

L'attività di formazione della candidata Larisa Lvova è iniziata con il Dottorato di Ricerca in Chimica conseguito presso l'Università St. Petersburg State con una tesi sulle “membrane di sensori chimici per analisi di liquidi multicomponenti” e un Dottorato in Scienze Chimiche presso l'Università “Tor Vergata”, Roma, con una tesi su “Funzionalità delle porfirine per lo sviluppo di sensori chimici”.

La candidata ha un'ottima esperienza scientifica: Assegnista di ricerca, professore a contratto presso la Facoltà di Ingegneria dell'Università di Tor Vergata; consulente scientifico presso BriSence R&D Company, Copenhagen, Denmark, lecturer presso il Chemistry Department, Kwangwoon University, Seoul, Korea.

Ha partecipato ad attività Progettuali ed ha ottenuto Grants sia come partecipante che come investigatore principale.

L'attività scientifica della candidata consiste principalmente nella sintesi di nuovi leganti per sensori chimici e lo sviluppo e caratterizzazione di sensori chimici e biosensori. L'attività sperimentale e la realizzazione di sistemi multisensoriali di analisi (naso elettronico), che hanno trovato impiego nel monitoraggio ambientale, nell'analisi di alimenti, di campioni biologici e analisi clinica così come il rigoroso trattamento dei dati mediante analisi chemiometrica o multivariata, sono più pertinenti alla Chimica Analitica.

L'ottimo livello di competenza e reputazione scientifica internazionale sono attestati dalla partecipazione a numerose Conferenze Nazionali e Internazionali dove ha presentato contributi orali e poster e ad alcuni Congressi come Invited Speaker.

La candidata ha svolto il ruolo di redattore del libro “Multisensor Systems for Chemical Analysis - Materials and Sensors” ed ha ricevuto anche dei premi scientifici.

L'impatto della produzione scientifica presentata ai fini della valutazione è molto buono anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici, tuttavia in molte delle 30 pubblicazioni presentate si evince una coerenza prevalente con le tematiche della Chimica Analitica.

Il contributo individuale della candidata si evince da numerose presenze come autore corrispondente e primo autore. La consistenza complessiva della produzione scientifica è attestata da oltre 40 pubblicazioni.



Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica e sulla qualità della produzione scientifica è ottimo. Tale giudizio è confermato dall'aver conseguito l'Abilitazione scientifica nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/B2 (Fondamenti chimici delle tecnologie).

Purtroppo la valutazione complessiva ai fini del concorso è penalizzata dal fatto che molte delle pubblicazioni presentate sono coerenti con il settore concorsuale 03/A1 – Chimica Analitica, e la produzione scientifica e l'esperienza maturata sono poco aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando e pertanto non si evince la coerenza con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

COMMISSARIO Anna Maria Musinu

Valutazione sui titoli

La candidata Larisa Lvova si è laureata in Chimica (1996) e ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Chimica Fisica (2004) presso l'Università S t. Petersburg State (St. Petersburg Russia) con una tesi sulle “membrane di sensori chimici per analisi di liquidi multicomponenti” e un Dottorato in Scienze Chimiche presso l'Università “Tor Vergata”, Roma, con una tesi su Funzionalità delle porfirine per lo sviluppo di sensori chimici. Ha conseguito l'Abilitazione scientifica nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/B2 Fondamenti chimici delle tecnologie. La candidata ha un'ottima esperienza scientifica: Assegnista di ricerca per 2 anni, dal 2012 al 2014, Professore a contratto per 3 anni dal 2009 al 2012, presso il Department of Chemical Science and Technologies, University “Tor Vergata”, Rome, professore a contratto dal 2006 al 2015 e Borsista dal 2003 al 2004 presso la Faculty of Engineering, University “Tor Vergata”, Rome; consulente scientifico presso BriSence R&D Company, Copenhagen, Denmark, 2001-2002. Ha effettuato un periodo di permanenza di 1 anno (2000-2001) come lecturer presso Chemistry Department, Kwangwoon University, Seoul, Korea.

Ha partecipato ad attività Progettuali ottenendo Grants come investigatore principale e partecipante: (2012-2014) ACQUASENSE Made in Italy - Industria 2015, (2005-2008) OMRISK EU 6th framework program (INCO RUSSIA + NIS-1, (2002-2004) ELEN-TOOL CRAFT, EU 5th framework program, 2006-2007 LIQUID Finanziamento di fondiaria FILAS.

Ha partecipato a 50 Conferenze Nazionali e Internazionali dove ha presentato contributi orali o poster e a tre Congressi come Invited Speaker, che dimostrano l'**ottimo livello** di competenza e reputazione scientifica internazionale raggiunto, che le ha consentito di ricevere anche dei premi scientifici. Svolge attività di reviewer per diverse riviste, prevalentemente attinenti alla Chimica Analitica.

Ha svolto il ruolo redattore del libro “Multisensor Systems for Chemical Analysis - Materials and Sensors”.

L'attività scientifica riguarda la sintesi di nuovi leganti per sensori chimici e lo sviluppo e caratterizzazione di sensori chimici e biosensori, metodi elettrochimici di analisi e trattamento dei dati con l'analisi chemiometrica o multivariata, **non attinente** con l'attività di ricerca richiesta dal bando di concorso.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

La candidata presenta 25 pubblicazioni su riviste con peer-review e 5 capitoli di libro ai fini della valutazione, corredate da alcuni indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS).

Il contributo individuale della candidata si evince dalla presenza come primo o ultimo autore (16) e autore corrispondente (10 pubblicazioni). L'impatto della produzione scientifica presentata, è molto buono anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dalla candidata: numero totale di citazioni 698 e Impact factor totale 118. Delle 30 pubblicazioni presentate tuttavia si evince una coerenza prevalente con le tematiche della Chimica Analitica, e si fa rilevare che le Pubblicazioni n° 2,6,7,10,11,12,13,15,16 e 17 non sono coerenti col profilo richiesto nel bando.

Valutazione sulla produzione complessiva

La consistenza complessiva della produzione scientifica è attestata dalle 45 pubblicazioni (Database SCOPUS/ISI WOS). La Candidata dimostra una notevole autonomia risultando autore corrispondente per 12 pubblicazioni e primo o ultimo autore per 20 pubblicazioni e con un h-index = 15.

L'attività didattica ha riguardato l'insegnamento in diversi corsi di chimica generale a partire dal 2006 fino al 2015.



Il giudizio complessivo sull'attività scientifica, didattica e sulla qualità della produzione scientifica è **molto buono** ma non si evince la coerenza con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

Candidata Olga Russina

COMMISSARIO N. V. Pavel

Valutazione sui titoli

La candidata Olga Russina è laureata in Fisica e ha ottenuto il PhD in Germania (Università Tecnica di Berlino), con una tesi dal titolo "Indagine della dinamica microscopica nei pressi della transizione vetrosa", coerente con il settore 03/A2 e con il presente bando. Ha ottenuto l'abilitazione a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

La candidata possiede un'eccellente esperienza scientifica, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2 e maturata anche nel corso di esperienze all'estero. Ha svolto attività di ricerca come Investigatore principale in diversi progetti di ricerca e i risultati della sua attività sono stati apprezzati a livello internazionale, come si evince dai numerosi riconoscimenti scientifici (partecipazioni a congressi su invito e dagli articoli pubblicati come contributi su invito).

La candidata con un'età accademica di 14 anni (2002-2016) possiede, anche in considerazione dell'età accademica, un'eccellente esperienza scientifica.

L'attività svolta dalla candidata è focalizzata alla comprensione delle proprietà strutturali e dinamiche di liquidi ionici e molecolari e loro miscele a livello micro e mesoscopico.

A tale scopo sono state impiegate tecniche sperimentali complementari e metodi computazionali: principalmente scattering di raggi X e neutroni, nonché tecniche spettroscopiche quali scattering quasielastico di neutroni, spettroscopia Raman e Dinamica Molecolare e Reverse Monte Carlo.

Inoltre, la candidata si è dedicata allo studio dei processi di rilassamento locali e diffusivi in liquidi amorfi, quali polimeri o liquidi ionici/molecolari, mediante scattering quasielastico di neutroni.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Delle pubblicazioni presentate, 28/30 sono coerenti con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02 e anche le altre due pubblicazioni (n.1 e 2), come tema di ricerca, sono coerenti con la Chimica Fisica.

La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono perfettamente aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando (*"Attività di ricerca prevista: Caratterizzazione mediante Diffrazione di raggi X e metodi teorici di Dinamica Molecolare di Liquidi Ionici e Molecolari"*).

La produzione scientifica della candidata è di **eccellente livello qualitativo**. Nel contesto internazionale di riferimento, risulta ottima per rigore metodologico, originalità e qualità, anche in relazione ai principali indicatori bibliometrici, in particolare, citazioni (2012), numero medio di citazioni (67), IF totale (107), Autore corrispondente (12/30), Primo autore (17/30). Degno di menzione è che ISI WOS segnala quattro lavori come "Highly Cited Paper".

Valutazione sulla produzione complessiva

La produzione scientifica complessiva della candidata (**N. 40 pubblicazioni** su riviste scientifiche con peer-review e **un capitolo** di libro, pubblicati nel periodo 2002-2016) è continua nel tempo e di ottimo livello quantitativo. I parametri bibliometrici (citazioni, IFTotale, Hindex) sono allineati con quelli delle 30 pubblicazioni presentate e dimostrano quindi una produzione complessiva di ottima qualità. Le tematiche affrontate risultano aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando.

COMMISSARIO Eugenio Caponetti

L'attività di formazione della candidata Olga Russina è comprovata dalla partecipazione a Scuole di formazione Nazionali ed Internazionali. La candidata dimostra di avere un'ottima esperienza scientifica maturata sia come Assegnista di ricerca presso il dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza", che durante periodi di permanenza all'estero presso il Dipartimento "Materiali e Strumentazione" – Helmholtz Zentrum (Berlin) e presso il Centro Nazionale Ricerca Nucleare (Kurchatov, Kazakhstan). La candidata anche in considerazione dell'età accademica di 14 anni, dimostra di avere un'eccellente esperienza scientifica.

L'attività scientifica della candidata si è basata principalmente sulla caratterizzazione strutturale e dinamica di liquidi ionici e molecolari ed è stata condotta prevalentemente attraverso un approccio sperimentale che ha utilizzato



tecniche sperimentali e metodi computazionali come scattering di raggi X e neutroni, nonché tecniche spettroscopiche quali scattering quasielastico di neutroni, spettroscopia Raman, Dinamica Molecolare e Reverse Monte Carlo. Inoltre, la candidata si è dedicata allo studio dei processi di rilassamento locali e diffusivi in liquidi amorfi, quali polimeri o liquidi ionici/molecolari, mediante scattering quasi elastico di neutroni. Parte della caratterizzazione sperimentale è stata condotta presso Large Scale Facilities europee dove ha organizzato e partecipato a numerosi progetti.

La partecipazione a numerosi Congressi Nazionali e Internazionali dove ha presentato contributi su argomenti correlati con lo studio di liquidi ionici, a diverse Conferenze Internazionali come Invited Speaker e come chairperson dimostrano l'ottimo livello di competenza e reputazione scientifica internazionale raggiunti.

Ha partecipato a numerose attività Progettuali alcune delle quali come investigatore principale

Dall'analisi delle 30 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione si evince la notevole autonomia scientifica della candidata, la completa pertinenza alle tematiche del SSD CHIM/02 e la coerenza con il profilo indicato dal bando di concorso.

L'impatto della produzione scientifica presentata, può essere classificato come eccellente anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici. Inoltre quattro dei lavori sono citati come "Highly Cited Paper" da ISI WOS. Il contributo individuale della candidata, presente in molte delle pubblicazioni come primo, ultimo e autore corrispondente è notevole.

L'attività scientifica complessiva è perfettamente coerente con l'attività di ricerca richiesta dal bando di concorso. La consistenza complessiva della produzione scientifica è attestata da oltre 40 pubblicazioni presenti in Database come SCOPUS/ISI e WOS.

Il giudizio complessivo sull'attività scientifica e sulla qualità della produzione scientifica è ottimo e perfettamente coerente con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

La positività del giudizio è confermata dall'aver conseguito l'Abilitazione scientifica nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

COMMISSARIO Anna Maria Musinu

Valutazione sui titoli

La candidata Olga Russina si è laureata in Fisica e Informatica (1995) presso l'Università "S. Seifullin" (Akmola, Kazakhstan), laurea dichiarata equipollente alla Laurea Magistrale in Fisica presso l'Università di Messina e ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Naturali (2004) presso l'Università Tecnica di Berlino (Germania) con una tesi su "Indagine della dinamica microscopica nei pressi della transizione vetrosa", attinente alle tematiche della Chimica Fisica. Ha conseguito l'Abilitazione scientifica nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2. La candidata ha un'ottima esperienza scientifica: Assegnista di ricerca per complessivi 6 anni, dal 2010 al 2016, presso il dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza", ha effettuato un periodo di permanenza di quasi 2 anni all'estero (2004-2005) come borsista postdoc presso il Dipartimento "Materiali e Strumentazione" - Helmholtz Zentrum (Berlino) e di quasi 3 anni 1995-98 come Assistente di Ricerca presso l'Istituto di Sicurezza Radiologica ed Ecologica - Centro Nazionale Ricerca Nucleare (Kurchatov, Kazakhstan).

Ha partecipato ad attività Progettuali ottenendo Grants come investigatore principale: (2013) "Struttura e dinamica di sali liquidi fluorurati" Progetto di Ateneo Università di Roma e CASPUR (2012) "Rationalization of bulk performances hours of Alkali metal Oligoether Carboxilates" e ha partecipato ad altri progetti di Ateneo dell'Università La Sapienza di Roma, Progetti Awards, (2010-2015) e 2009 (PRIN-MIUR). Ha inoltre organizzato e partecipato a numerosi Progetti presso Large Scale Facilities : ILL (Institute Laue-Langevin, FR), e il BENSC (Berliner Neutron Scattering Center presso l'ex-Hahn-Meitner Institute (ora Helmholtz Zentrum Berlin) dove la candidata svolge attività di ricerca basata sullo scattering di neutroni e il ESRF (European Synchrotron Radiation Facility presso Grenoble, FR) dove la candidata svolge ricerca basata su scattering di raggi x.

Ha partecipato a 4 Conferenze Internazionali come Invited Speaker e come chair person che dimostrano l'ottimo livello di competenza e reputazione scientifica internazionale raggiunto, e a 14 Congressi Nazionali e Internazionali dove ha presentato contributi orali o poster su argomenti correlati con lo studio di liquidi ionici. La sua attività di Formazione ha comportato la Partecipazione a 2 Scuole di formazione Nazionali e 1 Internazionale.



Svolge il servizio come *Guest Editor* per la Special Issue dedicata a : "Mesoscopic structural and dynamic organization in ionic liquids" del Journal of Molecular Liquids (issue 210 del 2015).

L'attività scientifica della candidata riguarda la caratterizzazione della organizzazione strutturale mesoscopica in liquidi ionici condotta prevalentemente attraverso esperimenti presso Large Scale Facilities (sincrotrone, sorgenti di neutroni). La ricerca è condotta per mezzo dell'utilizzo sinergico di tecniche sperimentali (principalmente scattering di raggi x e neutroni, nonché tecniche spettroscopiche quali scattering quasielastico di neutroni, spettroscopia Raman) e computazionali (Dinamica Molecolare e Reverse Monte Carlo) per lo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di liquidi ionici e molecolari. L'attività scientifica è completamente coerente con l'attività di ricerca richiesta dal bando di concorso.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

La candidata presenta 30 pubblicazioni ai fini della valutazione, corredate da alcuni indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS). Da questa documentazione si evince chiaramente la coerenza con le tematiche del SSD CHIM/02 ed il contributo individuale del candidato, presente come primo o ultimo autore (20) e autore corrispondente (12 pubblicazioni). L'impatto della produzione scientifica presentata, è **eccellente** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dalla candidata: numero totale di citazioni 2012 e Impact factor totale 107.

La consistenza complessiva della produzione scientifica è attestata dalle 40 pubblicazioni (Database SCOPUS/ISI WOS) e da un capitolo di libro dei quali la candidata è coautrice. La Candidata dimostra una notevole autonomia risultando autore corrispondente per 12 pubblicazioni e primo o ultimo autore per 20 pubblicazioni e con un h-index = 21, numero totale di citazioni = 2344 e IF totale = 137.

Il giudizio complessivo sull'attività scientifica e sulla qualità della produzione scientifica è **ottimo** e chiaramente coerente con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

Candidato Francesco Sebastianelli

COMMISSARIO N. V. Pavel

Valutazione sui titoli

Il Candidato Francesco Sebastianelli è laureato in Chimica e ha ottenuto il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso L'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (2004). Il lavoro di dottorato è coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

Ha ottenuto l'abilitazione a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

Il candidato possiede un'esperienza scientifica ottima, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2, maturata in Italia e all'estero, dove ha svolto attività di ricerca come partecipante a diversi progetti di ricerca. La sua attività è stata riconosciuta a livello internazionale, come "invited speaker" a tre congressi.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Il candidato, con un'età accademica di 17 anni (2000-2016) possiede un'ottima esperienza scientifica. Delle pubblicazioni presentate, 27 sono coerenti con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02.

Le altre tre pubblicazioni, come tema di ricerca, sono attinenti alle ricerche svolte nel campo Chimico Fisico.

Nella sua attività scientifica il candidato F. Sebastianelli si è dedicato ai metodi di calcolo e ottimizzazione della ricerca dei minimi di superfici multidimensionali di energia potenziale, ai metodi Quantum Monte Carlo per la determinazione delle energie degli stati legati di clusters, clatrati, fullereni e a metodi di calcolo della diffusione elettrone-molecola, applicati allo studio dei danni provocati dalla radiazione e ai processi di formazione di molecole nell'ambiente interstellare.

La produzione scientifica e l'esperienza maturata, sono complessivamente pertinenti con le tematiche del SSD 03/A2, ma poco aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando ("**Attività di ricerca prevista: Caratterizzazione mediante Diffrazione di raggi X e metodi teorici di Dinamica Molecolare di Liquidi Ionici e Molecolari**").

La produzione scientifica del candidato, di ottimo livello, nel contesto internazionale di riferimento, risulta **molto buona** per rigore metodologico, originalità e qualità.

In relazione ai principali indicatori bibliometrici, in particolare, citazioni (569), numero medio di citazioni (18.9), IF totale (89.7), Autore corrispondente (3/30), Primo autore (14/30), il candidato ha raggiunto una **buona** visibilità.

Valutazione sulla produzione complessiva



Il candidato presenta una produzione complessiva pari a N. 50 pubblicazioni su riviste scientifiche con peer-review pubblicate nel periodo 2000-2015 (17 anni accademici) e 2 capitoli di libri. Le tematiche affrontate risultano poco aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando.

La produzione scientifica è continua nel tempo e di ottimo livello quantitativo. I parametri bibliometrici (citazioni (749), Hindex (15)) sono allineati con quelli delle 30 pubblicazioni presentate e dimostrano quindi una produzione complessiva di **qualità molto buona**.

COMMISSARIO Eugenio Caponetti

Il candidato Francesco Sebastianelli possiede un'esperienza scientifica molto buona, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2, iniziata con il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con una tesi riguardante lo "studio di strutture e interazioni in cluster di gas rari con impurezze ioniche attraverso metodi classici e quantistici".

Tale esperienza è continuata e maturata in Italia e all'estero, dove ha svolto attività di ricerca in diversi gruppi, partecipando a diversi progetti. La sua attività è stata riconosciuta a livello internazionale, come si può evincere anche dall'aver partecipato a numerosi Congressi Nazionali e Internazionali dove ha presentato contributi orali o poster e come "invited speaker" ad alcuni congressi.

Ha frequentato 5 Scuole di formazione Nazionali e Internazionali.

L'attività scientifica del candidato consiste prevalentemente nello studio di metodi per il calcolo di superfici di energia potenziale, metodi Monte Carlo per lo studio dell'energie degli stati debolmente legati in cluster di gas rari e molecole, clatrati, fullereni e metodi computazionali per peculiari applicazioni a sistemi biologici e a processi di formazione di molecole nel mezzo interstellare.

Nella maggior parte delle 30 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione, è evidente la coerenza con le tematiche del SSD CHIM/02. L'impatto della produzione scientifica presentata è considerevole, anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici. Il contributo individuale del candidato si evince anche dalla presenza come primo autore e come autore corrispondente in diverse pubblicazioni.

La consistenza complessiva della produzione scientifica è attestata da 50 pubblicazioni e risulta molto buona per rigore metodologico, originalità e qualità. L'attività scientifica complessiva è di ottimo livello, ed è coerente con le tematiche del settore 03/A2 e di ottimo livello, nel contesto internazionale di riferimento.

Il giudizio complessivo sull'attività svolta dal candidato e sulla qualità della produzione scientifica è molto buono. Tale attività è coerente con le tematiche del settore 03/A2 ma non è coerente con il profilo indicato nel bando di concorso del Dipartimento di Chimica. La positività del giudizio è confermata dall'aver conseguito l'Abilitazione scientifica nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

COMMISSARIO Anna Maria Musinu

Valutazione sui titoli

Il candidato Francesco Sebastianelli si è laureato in Chimica (2000) e ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (2004) presso l'Università di Roma La Sapienza, con una tesi riguardante lo "studio di strutture e interazioni in cluster di gas rari con impurezze ioniche attraverso metodi classici e quantistici", coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/A2 CHIM/02. Ha conseguito l'Abilitazione scientifica nazionale a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2. Il candidato ha svolto la sua attività scientifica come Contrattista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (2003- 2004; 2007 2008; oltre due anni complessivi), Borsista presso il centro di calcolo interuniversitario CASPUR per una collaborazione con il Dip.to di Chimica dell'Università "La Sapienza" (2009 –2011) e Assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università "Sapienza" di Roma (2012 -2015).

Ha effettuato un periodo di permanenza di quasi 3 anni all'estero (2004-2007) come borsista postdoc presso la New York University, USA, nel gruppo di chimica fisica del professor Zlatko Bačić, dove ha affrontato lo studio di cluster



di idrogeno con impurezze e analisi energetica e strutturale di idrogeno molecolare in clatrati idrati con metodi Montecarlo quantistici.

Ha vinto il Premio di laurea "G. Stampacchia" (anno 2002) destinato alla prima opera pubblicata da un laureato in Chimica, Roma, Università degli Studi di Roma "La Sapienza".

Le sue competenze scientifiche sono state apprezzate in campo internazionale come dimostrato dalle 3 Conferenze Internazionali come Invited Speaker e la partecipazione a 13 Congressi Nazionali e Internazionali dove ha presentato contributi orali o poster. Ha frequentato 5 Scuole di formazione Nazionali e Internazionali.

Vengono esaminati il curriculum ed i titoli presentati dal candidato ai fini della valutazione comparativa. L'attività scientifica del candidato ha riguardato prevalentemente lo studio di metodi per il calcolo di superfici di energia potenziale, metodi Monte Carlo per lo studio dell'energie degli stati debolmente legati in cluster di gas rari e molecole, clatrati, fullereni e metodi computazionali per peculiari applicazioni a sistemi biologici e a processi di formazione di molecole nel mezzo interstellare. L'attività scientifica è di ottimo livello, è coerente con le tematiche del settore 03/A2 ma non è coerente con l'attività di ricerca richiesta dal bando di concorso.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Dall'esame delle 30 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione, si evince chiaramente la coerenza con le tematiche del SSD CHIM/02 in 28 pubblicazioni; altre 2 sono attinenti alle ricerche nel campo dell'astronomia (n° 26) e delle Scienze ambientali (n°30) e comunque tutte valutabili. Il contributo individuale del candidato è rilevabile dalla sua presenza come primo autore in 14 pubblicazioni e come autore corrispondente in 3 pubblicazioni.

L'impatto della produzione scientifica presentata è molto buono, anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS): numero totale di citazioni 569 e Impact factor totale 90.

Valutazione sulla produzione complessiva

La consistenza complessiva della produzione scientifica è attestata da 50 pubblicazioni (Database SCOPUS/ISI WOS) e da due capitoli di libro dei quali il candidato è coautore, in 19 dei quali è primo autore. I parametri bibliometrici mostrano un h-index = 17 e numero totale di citazioni=749.

Il giudizio complessivo sull'attività scientifica e sulla qualità della produzione scientifica è molto buono, è coerente con le tematiche del settore 03/A2 ma non è coerente con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso.

L'attività didattica è coerente con quella richiesta nel profilo del Bando di Concorso e riguarda lo svolgimento di esercitazioni per i corsi di Chimica Fisica e Meccanica Quantistica e presso il Dipartimento di Chimica dell'Università La Sapienza di Roma, presso il quale il candidato è stato cultore della materia.

Giudizi Collegiali

Il candidato Lorenzo Gontrani, considerata l'età accademica, possiede **un'ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani. La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono perfettamente aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando. L'impatto della produzione scientifica presentata, è **ottimo** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato, e si evince la sua notevole autonomia. L'attività didattica è coerente con quella richiesta nel profilo del Bando di Concorso.

Considerati: l'attività scientifica di formazione e didattica, pertinenti al settore scientifico disciplinare 03/A2, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 e la coerenza con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso, il giudizio collegiale complessivo è **ottimo**.



La candidata Larisa Lvova, considerata l'età accademica, possiede **un'ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani e stranieri, riconosciuta anche dall'abilitazione a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/B2 Fondamenti chimici delle tecnologie.

L'impatto della produzione scientifica presentata e quella complessiva è **molto buono** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato o estratti dalla Commissione, e si evince **una buona autonomia** del candidato.

La produzione scientifica presentata e quella complessiva, l'esperienza maturata e l'attività didattica sono poco aderenti con l'attività di ricerca e didattica previste dal bando.

Considerati: l'attività scientifica di formazione e didattica, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il 03/B2 "Fondamenti chimici delle tecnologie", poco aderenti con il profilo richiesto dal bando, il giudizio collegiale complessivo è **buono**.

La candidata Olga Russina, considerata l'età accademica, possiede un **ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani e stranieri, riconosciuta a livello internazionale.

La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono perfettamente aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando. Per la sua età accademica, l'impatto della produzione scientifica presentata, e di quella complessiva è **eccellente** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dalla candidata, e si evince la notevole l'autonomia della candidata.

Considerati: l'attività scientifica di formazione, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2, l'ottima reputazione scientifica internazionale, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 e la coerenza con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso, il giudizio collegiale complessivo è **ottimo**.

Il candidato Francesco Sebastianelli, considerata l'età accademica, possiede **un'ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani e stranieri. La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono aderenti con il Settore Concorsuale 03/A2 ma poco coerenti con l'attività di ricerca prevista dal bando.

L'impatto della produzione scientifica presentata, è **molto buono**, anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato, e si evince una discreta autonomia del candidato. L'attività didattica, limitata, è coerente con quella richiesta nel profilo del Bando di Concorso.

Considerati: l'attività scientifica di formazione, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2 ma poco aderente con il profilo richiesto dal bando, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 il giudizio collegiale complessivo è **molto buono**.



PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCORSALE 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.R. N. 1900/2016 DEL 03.08.2016.

(Codice Concorso 2016RTDB010, pubblicato sulla Gazzetta Ufficiale – IV serie speciale n. 64 del 12.08.2016)

VERBALE N. 4 – Allegato F

Valutazione collegiale del seminario e della prova in lingua straniera (inglese) indicata nel bando.

A seguito della nomina di cui al Decreto Rettorale n. n. 2334/2016 del 27.09.2016, i sottoscritti commissari della selezione citata in epigrafe:

Prof. Eugenio CAPONETTI – Professore Ordinario – Università di Palermo - componente;

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU - professore Ordinario – Università di Cagliari – segretario;

Prof. Nicolae Viorel PAVEL – Professore Ordinario – Sapienza Università di Roma - presidente

si riuniscono per la seduta dedicata ai colloqui, in Roma, nei locali del Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza" (Aula Parravano, Edificio S. Cannizzaro), in data 15 Dicembre alle ore 9.30.

Tutti i membri della commissione sono presenti.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 9.35.

Sono presenti i Dottori:

1)Lorenzo Gontrani

2)Larisa Lvova

3)Olga Russina

4)Francesco Sebastianelli

Alle ore 9.40 inizia la discussione dei titoli e delle pubblicazioni da parte dei candidati.

Candidato Lorenzo Gontrani

Argomenti trattati nel corso del colloquio:

Presentazione della attività di formazione e della attività e dei riconoscimenti scientifici

Il candidato illustra la sua attività di ricerca riguardante lo studio teorico e computazionale mediante metodologie simulative, di sistemi liquidi come liquidi molecolari, ionici e loro miscele. I commissari intervengono nel corso del seminario chiedendo delucidazioni sugli argomenti trattati e sulle metodologie impiegate.

Accertamento delle competenze linguistico scientifiche del candidato:

L'accertamento delle competenze linguistiche (inglese) avviene mediante la lettura e traduzione di un brano selezionato casualmente da un testo scientifico.

Valutazione collegiale della Commissione sul seminario e sull'accertamento delle competenze linguistico scientifiche:

Il candidato dimostra di padroneggiare con sicurezza sia le tecniche sperimentali utilizzate che i metodi di simulazione, ma è evidente la sua propensione nei riguardi di metodi computazionali quali la Dinamica Molecolare, i Calcoli Ab initio e il MolecularModeling. L'attività di ricerca futura anche se è indirizzata ad applicazioni pratiche dei sistemi studiati è ancora lontana da applicazioni concrete.

A seguito delle delucidazioni richieste su

- complementarietà della tecnica NMR con le tecniche di diffrazione per quanto riguarda lo studio strutturale dei liquidi ionici.

-l'effetto a livello molecolare dei liquidi ionici sul trattamento protettivo della carta.

- la correlazione tra la biodegradabilità e la durata nel tempo del trattamento protettivo.

Il candidato risponde esaurientemente alle domande.



Il candidato dimostra di padroneggiare la lingua inglese

Candidata Olga Russina

Argomenti trattati nel corso del colloquio:

Presentazione della attività di formazione e della attività e dei riconoscimenti scientifici

La candidata illustra la sua attività di ricerca focalizzata alla comprensione delle proprietà strutturali e dinamiche di liquidi ionici e molecolari e loro miscele a livello micro e mesoscopico attraverso l'impiego di tecniche sperimentali quali scattering di raggi X e neutroni. I commissari intervengono nel corso del seminario chiedendo delucidazioni sugli argomenti trattati e sulle metodologie impiegate.

Accertamento delle competenze linguistico scientifiche del candidato:

L'accertamento delle competenze linguistiche (inglese) avviene mediante la lettura e traduzione di un brano selezionato casualmente da un testo scientifico.

Valutazione collegiale della Commissione sul seminario e sull'accertamento delle competenze linguistico scientifiche:

La candidata dimostra di padroneggiare con sicurezza sia le tecniche sperimentali utilizzate che i metodi di simulazione quali la Dinamica Molecolare, i Calcoli Ab initio e il Molecular Modeling, dimostrando una propensione per le tecniche sperimentali.

Dalla presentazione si evince che l'attività di ricerca è finalizzata esclusivamente allo studio strutturale dei sistemi analizzati indirizzata ad applicazioni pratiche dei sistemi studiati è ancora lontana da applicazioni concrete.

A seguito delle delucidazioni richieste su

- correlazione tra la lunghezza della catena dei liquidi ionici a catena idrogenata e quelli a catena fluorurata.
- applicazioni pratiche dei sistemi studiati

La candidata risponde esaurientemente alle domande.

La candidata dimostra di padroneggiare la lingua inglese

Candidata Larisa Lvova

Argomenti trattati nel corso del colloquio:

Presentazione della attività di formazione e della attività e dei riconoscimenti scientifici

La candidata illustra la sua attività di ricerca riguardante lo sviluppo di sensori chimici e biosensori che hanno trovato impieghi nell'analisi di bevande e cibo. I commissari intervengono nel corso del seminario chiedendo delucidazioni sugli argomenti trattati e sulle metodologie impiegate.

Accertamento delle competenze linguistico scientifiche del candidato:

L'accertamento delle competenze linguistiche (inglese) avviene mediante la lettura e traduzione di un brano selezionato casualmente da un testo scientifico.

Valutazione collegiale della Commissione sul seminario e sull'accertamento delle competenze linguistico scientifiche:

La candidata dimostra di padroneggiare con sicurezza le problematiche affrontate e le numerose tecniche sperimentali utilizzate e di avere notevoli competenze sul proprio settore di ricerca che si inserisce tra la Chimica Fisica e la Chimica Analitica. Dalla presentazione si evince che l'attività di ricerca ha diverse ricadute applicative.

A seguito delle delucidazioni richieste su

- possibilità di utilizzo del "Sudan" come colorante in campi differenti da quello alimentare.
- possibilità di utilizzo dell'elettropolimerizzazione per creare una ricoprimento protettivo di un oggetto metallico.
- l'importanza della morfologia della superficie dell'elettrodo per l'omogeneità della deposizione



- L'importanza dell'impiego dei liquidi ionici come sensori
La candidata risponde esaurientemente alle domande.
La candidata dimostra di padroneggiare la lingua inglese

Candidato Francesco Sebastianelli

Argomenti trattati nel corso del colloquio:

Presentazione della attività di formazione e della attività e dei riconoscimenti scientifici

Il candidato illustra la sua attività di ricerca riguardante l'impiego di metodi per il calcolo di superfici di energia potenziale, metodi Monte Carlo per lo studio delle energie degli stati debolmente legati in cluster di gas rari e molecole, clatrati, fullereni e metodi computazionali per peculiari applicazioni nel monitoraggio ambientale e a processi di formazione di molecole nel mezzo interstellare. I commissari intervengono nel corso del seminario chiedendo delucidazioni sugli argomenti trattati e sulle metodologie impiegate.

Accertamento delle competenze linguistico scientifiche del candidato:

L'accertamento delle competenze linguistiche (inglese) avviene mediante la lettura e traduzione di un brano selezionato casualmente da un testo scientifico.

Valutazione collegiale della Commissione sul seminario e sull'accertamento delle competenze linguistico scientifiche:

Il candidato espone con chiarezza l'attività di ricerca che ha risolti prettamente teorici e dimostra di padroneggiare con sicurezza i metodi computazionali e le tecniche di calcolo utilizzati.

A seguito delle delucidazioni richieste su

- informazioni sulla presenza di molecole e frammenti di molecole nello spazio interstellare
- importanza delle costanti cinetiche
- possibilità di applicazioni di calcolo con l'uso algoritmi genetici per previsioni sull'inquinamento

Il candidato risponde esaurientemente alle domande.

Il candidato dimostra di padroneggiare la lingua inglese

La Commissione termina i propri lavori alle ore 16:40

Letto, approvato e sottoscritto.

Prof. Nicolae Viorel PAVEL presidente

Prof. Eugenio CAPONETTI membro

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU segretario



Allegato F1

PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCURSALE 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.R. N. 1900/2016 DEL 03.08.2016.

(Codice Concorso 2016RTDB010, pubblicato sulla Gazzetta Ufficiale – IV serie speciale n. 64 del 12.08.2016)

Lista delle presenze al colloquio del 15 Dicembre 2016 per il bando in epigrafe e documenti identificativi

Sono presenti i Dottori:

1)Lorenzo Gontrani

Identificato con il documento di riconoscimento Carta Identità AR2206730 – Comune di Roma

2)Larisa Lvova

Identificata con il documento di riconoscimento Carta Identità AR9816627 - Comune di Ciampino

3)Olga Russina

Identificata con il documento di riconoscimento Carta Identità AV6837749 – Comune di Frascati

4)Francesco Sebastianelli

Identificato con il documento di riconoscimento Passaporto – Italia – YA1174290

Letto, approvato e sottoscritto.

Prof. Nicolae Viorel PAVEL presidente

Prof. Eugenio CAPONETTI membro

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU segretario

VERBALE N. 5 – Allegato G

Giudizio collegiale comparativo complessivo in relazione al curriculum ed agli altri titoli

A seguito della nomina di cui al Decreto Rettorale n. n. 2334/2016 del 27.09.2016, i sottoscritti commissari della selezione citata in epigrafe:

Prof. Eugenio CAPONETTI – Professore Ordinario – Università di Palermo - componente;

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU - professore Ordinario – Università di Cagliari – segretario;

Prof. Nicolae Viorel PAVEL – Professore Ordinario – Sapienza Università di Roma - presidente

si riuniscono per la seduta dedicata alla valutazione dei titoli, in Roma, nei locali del Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza", in data 15 Dicembre alle ore 16:50.

Tutti i membri della commissione sono presenti.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 16:50.

La Commissione sulla base delle valutazioni effettuate per ogni candidato esprime i giudizi complessivi comparativi sui candidati.

Giudizi complessivi:

Candidato Lorenzo Gontrani

Il candidato Lorenzo Gontrani, considerata l'età accademica, possiede **un'ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani. La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono perfettamente aderenti con



l'attività di ricerca prevista dal bando. L'impatto della produzione scientifica presentata, è **ottimo** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato, e si evince la sua notevole autonomia. L'attività didattica è coerente con quella richiesta nel profilo del Bando di Concorso.

Considerati: l'attività scientifica di formazione e didattica, pertinenti al settore scientifico disciplinare 03/A2, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 e la coerenza con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso, il giudizio collegiale complessivo è **ottimo**.

Il candidato ha esposto in maniera chiara e ha trattato gli argomenti relativi alla sua attività di ricerca e alla sua formazione con competenza e professionalità e pertanto la commissione esprime sul seminario un giudizio complessivo ottimo.

La candidata Larisa Lvova, considerata l'età accademica, possiede **un'ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani e stranieri, riconosciuta anche dall'abilitazione a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/B2 Fondamenti chimici delle tecnologie.

L'impatto della produzione scientifica presentata e quella complessiva è **molto buono** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato o estratti dalla Commissione, e si evince **una buona autonomia** del candidato.

La produzione scientifica presentata e quella complessiva, l'esperienza maturata e l'attività didattica sono poco aderenti con l'attività di ricerca e didattica previste dal bando.

Considerati: l'attività scientifica di formazione e didattica, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il 03/B2 "Fondamenti chimici delle tecnologie", poco aderenti con il profilo richiesto dal bando, il giudizio collegiale complessivo è **buono**.

La candidata ha esposto in maniera chiara e ha trattato gli argomenti relativi alla sua attività di ricerca e alla sua formazione con competenza e professionalità e pertanto la commissione esprime sul seminario un giudizio complessivo ottimo.

La candidata Olga Russina, considerata l'età accademica, possiede un **ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani e stranieri, riconosciuta a livello internazionale.

La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono perfettamente aderenti con l'attività di ricerca prevista dal bando. Per la sua età accademica, l'impatto della produzione scientifica presentata, e di quella complessiva è **eccellente** anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dalla candidata, e si evince la notevole l'autonomia della candidata.

Considerati: l'attività scientifica di formazione, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2, l'ottima reputazione scientifica internazionale, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 e la coerenza con il profilo indicato dal Dipartimento di Chimica nel bando di concorso, il giudizio collegiale complessivo è **ottimo**.

Il candidato ha esposto in maniera chiara e ha trattato gli argomenti relativi alla sua attività di ricerca e alla sua formazione con competenza e professionalità e pertanto la commissione esprime sul seminario un giudizio complessivo ottimo.

Il candidato Francesco Sebastianelli, considerata l'età accademica, possiede **un'ottima esperienza scientifica**, maturata in diversi gruppi di ricerca italiani e stranieri. La produzione scientifica e l'esperienza maturata sono aderenti con il Settore Concorsuale 03/A2 ma poco coerenti con l'attività di ricerca prevista dal bando.



L'impatto della produzione scientifica presentata, è **molto buono**, anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici (Database SCOPUS/ISI WOS) dichiarati dal candidato, e si evince una discreta autonomia del candidato. L'attività didattica, limitata, è coerente con quella richiesta nel profilo del Bando di Concorso.

Considerati: l'attività scientifica di formazione, pertinente al settore scientifico disciplinare 03/A2 ma poco aderente con il profilo richiesto dal bando, la qualità della produzione scientifica, l'abilitazione conseguita a professore di II fascia per il Settore Concorsuale 03/A2 il giudizio collegiale complessivo è **molto buono**.

Il candidato ha esposto in maniera chiara e ha trattato gli argomenti relativi alla sua attività di ricerca e alla sua formazione con competenza e professionalità e pertanto la commissione esprime sul seminario un giudizio complessivo ottimo.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 18:40

Letto, approvato e sottoscritto.

Prof. Nicolae Viorel PAVEL presidente

Prof. Eugenio CAPONETTI membro

Prof.ssa Anna Maria Giovanna MUSINU segretario





