PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/B1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/03 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.R. N. 1828/2018 DEL 12/07/2018

VERBALE N. 3 – SEDUTA VALUTAZIONE TITOLI

L'anno 2019, il giorno 26 del mese di Febbraio in Roma si è riunita alle ore 9:30, in modalità telematica, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva di chiamata per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato di tipologia B per il Settore Concorsuale 03/B1- Settore scientifico-disciplinare CHIM/03 - presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.R. n. 2441/2018 del 12/10/2018 e composta da:

- Prof. Vito LIPPOLIS (Presidente);
- Prof. Adriana BIGI (componente);
- Prof. Stefano STRANGES (Segretario).

Tutti i membri della Commissione sono collegati in modalità telematica mediante connessione via Email con i rispettivi indirizzi istituzionali di posta elettronica.

La commissione non si è riunita nella data stabilita nel verbale n.2, dati gli inderogabili impegni di didattica e di ricerca dei membri della commisione. A tal proposito, il Presidente informa la Commissione che, con D.R. n. 270/2019 del 23.01.2019, la proroga dei termini per lo svolgimento e conclusione dei lavori concorsuali è stata concessa e fissata per il giorno 18 Aprile 2019.

La Commissione, presa visione dell'elenco dei candidati e della rinuncia del candidato Dott. Gontrani Lorenzo, unica rinuncia sino ad ora pervenuta, prende atto che i candidati da valutare ai fini della procedura sono otto, e precisamente:

- 1. MANCINI Giordano;
- 2. MAZZARO Raffaello;
- 3. MELONI Simone;
- 4. MIGLIORATI Valentina;
- 5. NAVARRA Maria Assunta;
- 6. RIGAMONTI Luca;
- 7. SALASSA Giovanni;
- 8. VIOLA Elisa

La Commissione inizia la valutazione dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati, seguendo l'ordine alfabetico.

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

Si procede all'esame dei titoli, del profilo curriculare, delle pubblicazioni, ivi incluse le tesi di dottorato, ritenuti valutabili in base all'allegato B del verbale N. 2, ai fini della formulazione del giudizio individuale da parte di ciascun commissario e di quello collegiale espresso dalla Commissione per ciascun candidato. I giudizi dei singoli commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (allegato C).

Sulla base della valutazione dei titoli, del profilo curriculare e delle pubblicazioni ed, in particolare, sulla base della valutazione della produzione scientifica dei candidati, sono ammessi a sostenere il colloquio i Dottori:

- 1. MANCINI Giordano:
- 2. MAZZARO Raffaello;
- 3. MELONI Simone;
- 4. MIGLIORATI Valentina;
- 5. NAVARRA Maria Assunta;

- 6. RIGAMONTI Luca;
- 7. SALASSA Giovanni;
- 8. VIOLA Elisa

Il colloquio si terrà il giorno 26/03/2019, alle ore 9:00 nella stanza n. 7 sita al I piano dell'Edificio Vincenzo Caglioti – 032 (ex NEC) del Dipartimento di Chimica dell'Università La Sapienza, piazzale Aldo Moro, 5 – 00185 Roma.

Il Presidente incarica il Segretario della Commissione di consegnare il presente verbale, con una nota di trasmissione e la lettera di richiesta di convocazione dei candidati, al responsabile del procedimento.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 11:00.
Letto, confermato e sottoscritto.
PER LA COMMISSIONE
Prof. Stefano STRANGES

ALLEGATO C AL VERBALE N. 3 GIUDIZI INDIVIDUALI E COLLEGIALI SU TITOLI E PUBBLICAZIONI

PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/B1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/03 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.R. N. 1828/2018 DEL 12/07/2018

L'anno 2019, il giorno 26 del mese di Febbraio in Roma si è riunita, in modalità telematica, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva di chiamata per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato di tipologia B per il Settore Concorsuale 03/B1- Settore scientifico-disciplinare CHIM/03 - presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.R. n. 2441/2018 del 12/10/2018 e composta da:

- Prof. Vito LIPPOLIS professore ordinario presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'Università di Cagliari; (Presidente);
- Prof. Adriana BIGI professore ordinario presso il Dipartimento di Chimica "Giacomo Ciamician" dell'Università di Bologna; (componente);
- Prof. Stefano STRANGES professore associato presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Segretario).

Tutti i membri della Commissione sono collegati in modalità telematica mediante connessione via Email con i rispettivi indirizzi istituzionali di posta elettronica.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 9:30 e procede ad elaborare la valutazione individuale e collegiale dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati, seguendo l'ordine alfabetico.

CANDIDATO: MANCINI Giordano

TITOLI PRESENTATI

- 1. Titolo di studio: Laurea in Chimica (V.O.) conseguito il 27/05/2004 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". (Allega certificato di laurea con votazione esami (media 26.78/30 e n.1 lode) e votazione di Laurea pari a 110/110 e lode)
- 2. Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, conseguito il 08/02/2008 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza. (allega certificato).
- 3. Dottorato di Ricerca in Genetica e Biologia Cellulare, conseguito il 23/04/2012 presso l'Università degli Studi della Tuscia. (titolo dichiarato)
- 4. Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1, conseguita il 12/04/2017, nella tornata 2016. Si allega il giudizio della commissione nazionale.
- 5. Lettera di Presentazione del Prof. Giuseppe Legname, del Lab oratory of Prion Biology, della SISSA (Trieste), a sostegno del candidato. (titolo trasmesso).
- 6. Lettera di presentazione del Prof. Riccardo Spezia, Laboratoire de Chimie Thèorique, LCT, Sorbonne Universitè, CNRS, F. 75005 Paris, France (titolo dichiarato).
- 7. Lettera di presentazione del Dr. Nuno Souse Cerqueira, Department of Chemistry and biochemistry Faculty of Sciences of Porto, Rua deo Campo Alegre, 687, 4169-007 Porto, Portugal. (titolo dichiarato)
- 8. 2007: Post-graduate studies Universeit Van Amsterdam (UVA), CECAM Course "Understanding Molecular simulations" winter school. (titolo dichiarato)
- 9. 2007: Post-graduate studies Edinburgh Parallel computing Centre (EPCC) Course on MPI parallel programming. (titolo dichiarato)

- 10. 2013: Post-graduate studies Istituto nazionale di fisica nucleare, Winter school Efficiency in Scientific Computing. (titolo dichiarato)
- 11. 2016: Post-graduate studies Coursera Machine learning online course. (titolo dichiarato)
- 12. 2016: Post-graduate studies, Stanford, Statistical Learning on line course. (titolo dichiarato)
- 13. 2017: Post-graduate studies Coursera Clustering in Data Mining online course. (titolo dichiarato)

ESPERIENZE PROFESSIONALI

- 14. 2007-2008: CNR/IMIP Bari, Italy; Post doc (assegno di ricerca) (titolo dichiararto)
- 15. 2012: Università degli Studi di Bari, Dipartimento di Biologia: co.co.co. (titolo dichiarato)
- 16. 2012-2013: Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy, Post Doc (assegno di ricerca) (titolo dichiarato)
- 17. 2013-2017: Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy, RTD-A, (titolo dichiarato)
- 18. 2014 computational Biochemistry Group, University of Porto, Visiting scientist. (titolo dichiarato)
- 19. 2016: National University of Singapore, Visiting scientist. (titolo dichiarato)
- 20. 2016: Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy, CECAM Node Director. (titolo dichiarato)
- 21. Dal 2016 ad oggi: Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy, Chief Operating Officer at SMART Lab. (titolo dichiarato)
- 22. 2005-2007: Consorzio Applicazioni di Supercalcolo per l'Università e Ricerca (CASPUR), Ph.D student fellowship. (titolo dichiarato)
- 23. 2008-2009: Consorzio Applicazioni di Supercalcolo per l'Università e Ricerca (CASPUR), co.co.co. (titolo dichiarato)
- 24. 2012: Consorzio Applicazioni di Supercalcolo per l'Università e Ricerca (CASPUR), co.co.co. (titolo dichiarato)
- 25. 2017: Gaussian Inc., Visiting Scientist. (titolo dichiarato)
- 26. Cinque periodi di misure presso l'ESRF di Grenoble (Francia) e uno a Elettra (Trieste) (titolo dichiarato

ATTIVITA' DIDATTICA

- 27. 2018: Scuola Normale Superiore: Advanced Scientific Computing (corso) (titolo dichiarato)
- 28. 2017 Scuola Normale Superiore: Scientific Computing (corso) (titolo dichiarato)
- 29. 2017 Scuola Normale Superiore: Virtual Laboratory of Chemistry (corso) (titolo dichiarato)
- 30. 2016 Scuola Normale Superiore: Scientific Computing (corso) (titolo dichiarato) VALUTABILE
- 31. 2016 Scuola Normale Superiore: Virtual Laboratory of Chemistry (corso) (titolo dichiarato)
- 32. 2015 Scuola Normale Superiore: Molecular modeling for biological systems and nanomaterials. (titolo dichiarato)
- 33. 2014 Scuola Normale Superiore: Molecular modeling for biological systems and nanomaterials. (titolo dichiarato)
- 34. 2012 CASPUR Molecular Dynamics of biological macromolecules (Lecture) (titolo dichiarato)
- 35. 2011 CASPUR Molecular Dynamics of biological macromolecules (Lecture). (titolo dichiarato)
- 36. 2010 Università di Roma Tor Vergata: Lecturs in Computational Biology. (titolo dichiarato)

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

37. 2017-2018: Membro della Società Chimica Italiana (Divisione di Chimica Fisica, Divisione di Chimica Teorica Computazionale)

FINANZIAMENTI

38. Il candidato dichiara di aver di aver partecipato come PI a 2 finanziamenti da bandi di Ateneo 1 finanziamento FIRB 2012, e 1 finanziamento INVIDIA GPU seeding program.

RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- 39. Il candidato dichiara la partecipazione a congressi nazionali ed internazionale come:
 - invited speaker: 1
 - membro del comitato scientifico e organizzativo: 1
 - membro del comitato organizzativo: 1
 - membro del comitato scientifico: 1

valutazione sui titoli

COMMISSARIO1: Prof. Vito Lippolis

Il candidato ha conseguito il diploma di Laurea (V.O.) in Chimica nel 2004 presso L'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" riportando la votazione di 110/110 e lode, e due dottorati di ricerca, uno in Scienze Chimiche nel 2008 presso la medesima università con la tesi dal titolo "A Combined Computational and XAS Approach to the Study of Structural and Dynamical Properties of Electrolitic Aqueous Solutions" e l'altro in Genetica e Biologia Cellulare nel 2012 presso l'Università degli Studi della Tuscia.

Nel 2017 il candidato ha ottenuto l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per il Settore Concorsuale 03/B1.

Il candidato non ha svolto attività didattica in ambito universitario pertinente al SSD CHIM/03. Ha svolto didattica universitaria in altri settori.

Dichiara di aver seguito numerosi corsi "Post-Graduate" anche all'estero, inerenti metodi di calcolo quantomeccanico; di essere stato titolare di due assegni di ricerca "Post Doc" (uno presso il CNR/IMIP di Bari e l'altro presso la Scuola Normale Superiore) e di tre contratti Co.Co.Co. (due presso il CASPUR di Roma e l'altro presso il Dipartimento di Biologia dell'università di Bari), e di essere stato ricercatore RTD-A nel periodo 2013-2017 Presso la Scuola Normale Superiore. Il candidato dichiara di essere stato PI per 4 progetti di ricerca e di aver partecipato come oratore ("invited") ad un congresso nazionale.

Complessivamente i titoli presentati dal candidato sono valutati come molto buono.

valutazione sui titoli

COMMISSARIO2: Prof.ssa Adriana Bigi

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica nel 2004 con la votazione di 110/110 e Lode, e successivamente (2008) il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (titolo della tesi: " A combined computational and XAS approach to the study of structural and dynamical properties of electrolytic aqueous solutions"), entrambi presso L'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Inoltre, nel 2012 ha conseguito il Dottorato di ricerca in Genetica e Biologia Cellulare presso l'Università degli Studi della Tuscia. Nella tornata del 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1. Dal 2007 al 2013 ha usufruito di 2 assegni di ricerca e di un contratto co.co.co. Inoltre, dichiara che nel periodo 2013-2017 ha svolto attività come RTD-A presso la Scuola Normale Superiore di Pisa, ma non specifica in quale SSD. In questi anni ha anche seguito diversi corsi post-laurea e ha trascorso alcuni periodi di ricerca come visiting scientist presso l'Università di Porto, l'Università di Singapore e presso la Gaussian Inc.E' stato Node Director del CECAM (2016) e reponsabile operativo del laboratorio SMART dal 2016, ed è membro della SCI nelle divisioni di Chimica Fisica e Chimica Teorica Computazionale. Da queste attività si evince che l'interesse principale di ricerca è la chimica computazionale. A conferma, l'attività didattica dichiarata dal candidato dal 2010 a oggi comprende diversi corsi focalizzati sulla chimica computazionale e sulla modellazione molecolare, ma non nel SSD CHIM/03. I titoli presentati comprendono anche la partecipazione come PI a 2 finanziamenti da bandi di Ateneo 1 finanziamento FIRB 2012, e 1 finanziamento INVIDIA GPU seeding program, e come invited speaker a un congresso nazionale. Allega una lettera di presentazione.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è buono.

valutazione sui titoli

COMMISSARIO3: Prof. Stefano Stranges

Il candidato ha conseguito il diploma di laurea (V.O.) in Chimica nel 2004 presso L'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", con voto 110/110 e lode e media degli esami 26.78/30 ed una lode, ed il dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 presso la medesima università. Il Candidato ha conseguito il dottorato di ricerca in Genetica e Biologia Cellulare nel 2012 presso l'Università degli Studi della Tuscia.

Nel 2017 il candidato ha ottenuto l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1. Il candidato non ha svolto attività didattica in ambito universitario, o equivalente, pertinente al SSD CHIM/03 del bando, pur avendo svolto didattica in altri settori.

Dichiara di aver seguito n. 6 corsi inerenti metodi di calcolo quantomeccanico; di essere stato titolare di un assegno di ricerca Post Doc (2007-2008) presso il centro CNR/IMIP di Bari, di tre contratti Co. Co. Co., due col centro ci calcolo CASPUR di Roma (2008-2009, 2012) ed uno col Dipartimento di Biologia dell'università di Bari; presso la Scuola Normale Superiore di Pisa di essere stato assegnista di ricerca Post Doc (2012-2013), ricercatore RTD-A nel periodo 2013-2017, Node Director del CECAM (2016) e reponsabile operativo del laboratorio SMART dal 2016; di aver trascorso periodi presso centri anche all'estero come visiting scientist e di aver partecipato a 5 turni di misura presso i centri di sincrotrone ad ESRF ed Elettra. Il candidato dichiara di essere stato PI in n. 4 progetti di cui un FIRB (2012) ed uno internazionale.

Trasmette una lettera di presentazione riguardante un suo contributo nella chimica teorica applicata nel campo della biologia prionica. IL candidato è membro della SCI nelle divisioni di Chimica Fisica e Chimica Teorica Computazionale. Dichiara infine di aver partecipato come oratore (invited) ad un congresso nazionale.

Complessivamente i titoli presentati dal candidato sono valutati come buoni.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

In assenza dei dati bibliometrici, non forniti dal candidato per le singole pubblicazioni trasmesse, la commissione ha proceduto alla loro determinazione utilizzando la banca dati SCOPUS.

- 1. F. Sessa, V. Migliorati, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, **G. Mancini** and P. D'Angelo. On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻ based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation. Phys. Chem. Chem. Phys., 2018, DOI: 10.1039/c7cp07497b. (IF=3.906; numero citazioni=1, Q1)
- 2. F. Fracchia, G. Del Frate, **G. Mancini**, W. Rocchia, and V. Barone. Force Field Parametrization of Metal Ions from Statistical Learning Techniques. J. Chem. Theory Comput., 2018, 14, 255-273. (IF=5.25 (2017); numero citazioni=2; Q1)
- 3. **G. Mancini,*** G. Brancato*, B. Chandramouli, V. Barone. Organic solvent simulations under non-periodic boundary conditions: A library of effective potentials for the GLOB model. Chem. Phys. Lett., 2015, dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2015.03.001.(IF=1.83; numero citazioni=4; Q2)
- 4. A. Salvadori, G. Del Frate M. Pagliai, **G. Mancini***, V. Barone. Immersive virtual reality in computational chemistry: Applications to the analysis of QM and MM data. Int. J. Quantum Chem., 2016, 116, 1731-1746. DOI: 10.1002/qua.25207. (IF=2.24; numero citazioni=9; Q1)
- 5. P. D'Angelo, V. Migliorati, I. Persson, **G. Mancini**, and S. Della Longa. Quantitative Analysis of Deconvolved X-ray Absorption Near-Edge Structure Spectra: A Tool To Push the Limits of the X-ray Absorption Spectroscopy Technique. Inorg. Chem., 2014, dx.doi.org/10.1021/ic501366d. (IF=4.69; numero citazioni=5; Q1)
- 6. V. Migliorati, **G. Mancini**, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, and P. D'Angelo. Hydration Properties of the Zn2+ Ion in Water at High Pressure. Inorg. Chem., 2013, 52, 1141-1150. (IF=4.794; numero citazioni=27; Q1)
- 7. P. D'Angelo, A. Zitolo, V. Migliorati, E. Bodo, G. Aquilanti, J. L. Hazemann, D. Testemale, **G. Mancini**, and R. Caminiti. X-Ray absorption spectroscopy investigation of 1-alkyl-3-methylimidazolium bromide salts J. Chem. Phys. 2011, 135, 074505. (IF=3.07; numero citazioni=22; Q1)
- 8. **G. Mancini,*** G. Brancato, and V. Barone. Combining the Fluctuating Charge Method, Non-periodic Boundary Conditions and Meta-dynamics: Aqua Ions as Case Studies. J. Chem. Theory Comput., 2014, dx.doi.org/10.1021/ct400988e. (IF=5.63; numero citazioni=12; Q1)

- M. Macchiagodena, G. Del Frate, G. Brancato, B. Chandramouli, G. Mancini, and V. Barone. Computational study of the DPAP molecular rotor in various environments: from force field development to molecular dynamics simulations and spectroscopic calculations. Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, 19, 30590-30602. (IF=4.04; numero citazioni=1; Q1)
- 10. V. Migliorati, **G. Mancini**, G. Chillemi, A. Zitolo, and P. D'Angelo. Effect of the Zn²⁺ and Hg²⁺ Ions on the Structure of Liquid Water. J. Phys. Chem. A, 2011, 115, 4798-4803.(IF=2.946; numero citazioni=30; Q1)
- 11. P. D'Angelo, V. Migliorati, F. Sessa, **G. Mancini**, and I. Persson. XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution, J. Phys. Chem. B, 2016, 120, 4114-4124. (IF=3.03; numero citazioni=14; Q1)
- 12. **G. Mancini,** C. Zazza, M. Aschi, and N. Sanna. Conformational analysis and UV/Vis spectroscopic properties of a rotaxane-based molecular machine in acetonitrile dilute solution: when simulations meet experiments. Phys. Chem. Chem. Phys., 2011, 13, 2342-2349. (IF=3.60; numero citazioni=14; Q1)
- 13. M. Macchiagodena, **G. Mancini**,* M. Paiai,* and V. Barone. Accurate prediction of bulk properties in hydrogen bonded liquids: amides as case studies. Phys. Chem. Chem. Phys., 2016, DOI: 10.1039/c6cp04666e. (IF=4.06; numero citazioni=9; Q1)
- 14. D. Presti, A. Pedone,* **G. Mancini,*** C. Duce, M. R. Tinè, and V. Barone. Insights into structural and dynamical features of water at halloysite interfaces probed by DFT and classical molecular dynamics simulations. Phys. Chem. Chem. Phys., 2016, 18, 2164-2174. (IF=4.06; numero citazioni=9; Q1)
- 15. C. Zazza, A. Coletta, N. Sanna, G. Chillemi, G. Mancini, and A. Desideri. Solvent Effects on the Valence UV-Vis Absorption Spectra of Topotecan Anticancer Drug in Aqueous Solution at Room Temperature: A Nanoseconds Time-Scale TD-DFT/MD Computational Study. J. Phys. Chem. B, 2010, 114, 6770-67778. (IF=2.27; numero citazioni=8; Q1)
- G. Mancini, I. D'Annessa, A. Coletta, G. Chillemi, Y. Pommier, M. Cushman, A. Desideri. Binding of an Indenoisoquinoline to the Topoisomerase-DNA Complex Induces Reduction of Linker Mobility and Strengthening of Protein-DNA Interaction. PLoS One. 2012, 7, e51354. (IF=4.15; numero citazioni=15; Q1)
- (*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

- **A.** originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);
- **B.** congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena/parziale/scarsa);
- **C.** rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso):
- **D.** apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso); **giudizio complessivo (A+B+C+D)** (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = scarsa; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = scarsa; C =ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO.**

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 3

A = eccellente; B = scarsa; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = scarsa; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente: B = parziale: C = ottimo: D = primario: giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato ha pubblicato i primi articoli scientifici nel 2005. Dichiara di aver pubblicato n. 60 lavori, corrispondenti ad una media di circa 4.6 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor di 208.48 corrispondente ad un valore medio per pubblicazione di 3.47, calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di aver ottenuto un totale di 803 citazioni (numero medio di citazioni per pubblicazione 13.38) che gli consentono di avere un H-index di 17.

<u>Valutazione sulla produzione complessiva:</u> (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività scientifica del candidato è indirizzata allo sviluppo di modelli e algoritmi di dinamica molecolare per la simulazione e predizione in combinazione con dati di spettroscopia XAS delle proprietà strutturali e di "bulk" di liquidi e soluzioni, sistemi disordinati e complessi anche di natura biologica. La produzione scientifica, intensa e sviluppata con continuità temporale, originalità e rigore metodologico, è comunque solo parzialmente congruente con il SSD CHIM/03. Le pubblicazioni sono di livello molto buono essendo pubblicate su riviste di prestigio internazionale con un buon impatto sulla comunità scientifica in considerazione del numero medio di citazioni per ciascuna di esse. L'apporto individuale del candidato è chiaramente enucleabile e significativo risultando autore di riferimento o primo autore in n.7 delle 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione e condotte in collaborazione, per lo più in ambito nazionale.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

La produzione scientifica del candidato è solo parzialmente congruente con il SSD CHIM/03 del bando Infatti, l'attività scientifica del candidato è focalizzata sulla chimica computazionale, e in particolare sullo sviluppo di modelli e calcoli di dinamica molecolare, che applica a diversi sistemi. Parte delle ricerche si avvalgono anche della combinazione dei dati di spettroscopia a raggi X con quelli di simulazione molecolare. Le 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione sono tutte su riviste internazionali ad ampia diffusione nella comunità scientifica e di livello generalmente molto buono. Molto buona anche l'originalità, la valenza scientifica, e il rigore metodologico. Le pubblicazioni presentate sono tutte in collaborazione, per lo più in ambito nazionale, e l'apporto individuale del candidato è chiaramente enucleabile e significativo, poiché è autore di riferimento o primo autore in n.7 pubblicazioni. La consistenza scientifica della produzione complessiva è intensa e regolare nel tempo.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

L'attività scientifica del candidato è rivolta principalmente alla chimica computazionale, ed in particolare alla simulazione di fenomeni di solvatazione e confronto con esperimenti, e a calcoli di dinamica molecolare in vari campi, quali ad esempio la chimica inorganica e la biologia. La produzione scientifica del candidato risulta essere parzialmente congruente con il SSD CHIM/03 del bando. La consistenza scientifica della produzione complessiva è molto buona, sviluppata con continuità temporale. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di quasi tutte le pubblicazioni presentate, e nel significativo numero di citazioni ottenute. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione e principalmente in ambito nazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, risultando il candidato autore di riferimento o primo autore in n.7 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica nel 2004 con la votazione di 110/110 e Lode, e successivamente (2008) il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (titolo della tesi: "A combined computational and XAS approach to the study of structural and dynamical properties of electrolytic aqueous solutions"), entrambi presso L'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Inoltre, nel 2012 ha conseguito il Dottorato di ricerca in Genetica e Biologia Cellulare presso l'Università degli Studi della Tuscia. Nella tornata del 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di Il Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1.

Dal 2007 al 2013 ha usufruito di 2 assegni di ricerca (uno presso il CNR/IMIP di Bari e l'altro presso la Scuola Normale Superiore) e di tre contratti Co.Co.Co. (due presso il CASPUR di Roma e l'altro presso il Dipartimento di Biologia dell'università di Bari). Inoltre, dichiara che nel periodo 2013-2017 ha svolto attività come RTD-A presso la Scuola Normale Superiore di Pisa, ma non specifica in quale SSD. In questi anni ha anche seguito numerosi corsi "Post-Graduate" inerenti metodi di calcolo quantomeccanico e ha trascorso alcuni periodi di ricerca come visiting scientist presso l'Università di Porto, l'Università di Singapore e presso la Gaussian Inc. E' stato Node Director del CECAM (2016) e reponsabile operativo del laboratorio SMART dal 2016, ed è membro della SCI nelle divisioni di Chimica Fisica e Chimica Teorica Computazionale. Da queste attività si evince che l'interesse principale di ricerca è la chimica computazionale. A conferma, l'attività didattica dichiarata dal candidato dal 2010 a oggi comprende diversi corsi focalizzati sulla chimica computazionale e sulla modellazione molecolare; il candidato non ha invece svolto attività didattica in ambito universitario pertinente al SSD CHIM/03. I titoli presentati comprendono anche la partecipazione come PI a 2 finanziamenti da bandi di Ateneo 1 finanziamento FIRB 2012, e 1 finanziamento INVIDIA GPU seeding program, e come invited speaker a un congresso nazionale. Allega una lettera di presentazione riguardante un suo contributo nella chimica teorica applicata nel campo della biologia prionica. IL candidato è membro della SCI nelle divisioni di Chimica Fisica e Chimica Teorica Computazionale

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è buono.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = scarsa; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività scientifica del candidato è indirizzata allo sviluppo di modelli e algoritmi di dinamica molecolare per la simulazione e predizione in combinazione con dati di spettroscopia XAS, delle

proprietà strutturali e di "bulk" di liquidi e soluzioni, sistemi disordinati e complessi anche di natura biologica. La produzione scientifica, intensa e sviluppata con continuità temporale, originalità e rigore metodologico, è comunque solo parzialmente congruente con il SSD CHIM/03.

Le pubblicazioni sono di livello molto buono essendo pubblicate su riviste di prestigio internazionale con un buon impatto sulla comunità scientifica in considerazione del numero medio di citazioni per ciascuna di esse. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione e principalmente in ambito nazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, poiché è autore di riferimento o primo autore in n.6 pubblicazioni. La consistenza scientifica della produzione complessiva è intensa e regolare nel tempo.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

CANDIDATO: MAZZARO Raffaello

TITOLI PRESENTATI

- 1. Laurea triennale in Chimica dei Materiali conseguita il 15/07/2010 presso l'Università di Bologna.
- 2. Laurea Magistrale in Fotochimica e Materiali Molecolari conseguita il 20/12/2012 presso l'Università di Bologna.
- 3. Dottorato di Ricerca in Chimica, conseguito il 10/05/2016 presso l'Università di Bologna Alma Mater Studiorum.
- **4.** Titolo della Tesi: "Graphene and Semicondutor or Metallic Nanoparticles for Energy Conversion" (titolo dichiarato)
- 5. 24 CFU supplementary per l'accesso a concorsi per l'insegnamento nella scuola secondaria (DM 616/2017).

ESPERIENZE PROFESSIONALI

- 6. 09/2017-09/2019 Kempe & Knul and Alice Wallemberg postdoctoral fellowship presso Lulea University of Technology (titolo dichiarato)
- 7. 06/2016-08-2017 University of Bologna Postdoctoral fellow (titolo dichiarato)
- 8. 01/01/2016 31/06/2016: Assegno di ricerca presso l'Università di Bologna (titolo dichiarato)
- 9. 05/2015- 08/2015 INRS-FMT Varennes (QC, Canada) visiting student (titolo dichiarato)
- 10. 01/2013-12/2018 CNR-IMM Associate researcher (titolo dichiarato)

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

- 11. SISM (Italian Society for Microscopic Science) 2015 award for young researchers within the MCM conference in Heger, Hungary. (titolo dichiarato)
- 12. G. P. Spada Award XVIII cycle, Best PhD Thesis in Chemistry in the University of Bologna scientific area: inorganic chemistry (titolo dichiarato)
- 13. GIF- Italian Photochemistry Group, Best Italian PhD Thesis in Photochemistry 2016. ((titolo dichiarato)
- 14. SISM (Italian Society for Microscopic Science) Best PhD Thesis in Microscopy sciences 2017- scientific area: Materials science (titolo dichiarato)

BREVETTI

n. 2 brevetti nazionali (titoli dichiarati)

Valutazione sui titoli

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Il candidato ha conseguito il titolo di Laurea Triennale in Chimica de Materiali nel 2010 (110/110 e lode) e di Laurea Magistrale in Fotochimica e Materiali Molecolari nel 2012 (110/110 e lode), presso l'Università di Bologna. Ha ottenuto il titolo di Dottorato di Ricerca in Chimica nel 2016, presso la stessa Università, con la tesi dal titolo "Graphene and semiconductor or metallic

nanoparticles for energy conversion". Il candidato non ha svolto attività didattica attinente a corsi universitari, o equivalente, pertinente al SSD CHIM/03.

Il candidato dichiara di essere stato studente visitatore presso l'Università INRS-EMT di Varennes (Canada), di aver usufruito di un contratto di "Post Doc" presso l'Università di Bologna, di essere titolare di un contratto "Post-Doc" presso l'Università di Luleå (Svezia), e di aver ricoperto il ruolo di "Associate Researcher" presso il dipartimento CNR-IMM. Dichiara inoltre di essere autore di n. 2 brevetti nazionali.

Complessivamente i titoli presentati dal candidato sono valutati come discreti.

COMMISSARIO2: Prof.ssa Adriana Bigi

Il candidato ha conseguito la laurea in Fotochimica e Materiali Molecolari nel 2012 con la votazione di 110/110 e Lode, e il Dottorato di ricerca in Chimica nel 2016, entrambi presso l'Università degli Studi Alma Mater Studiorum di Bologna. La sua tesi di dottorato, dal titolo "Graphene and semiconductor or metallic nanoparticles for energy conversion", è stata premiata dall'Università di Bologna (premio Spada), dal GIF- Italian Photochemistry Group e dalla SISM (Italian Society for Microscopic Science), Durante il periodo di dottorato ha trascorso un periodo di ricerca presso l'Università INRS-EMT di Varennes (Canada). Inoltre, dichiara di aver usufruito di un contratto di Post dottorato dal 06/2016-08/2017 presso l'Università di Bologna, di aver ricoperto il ruolo di ricercatore presso il dipartimento CNR-IMM nel periodo 01/2013-12/2018 e di essere attualmente titolare di un contratto Post-Doc presso l'Università di Luleå (Svezia). Non presenta titoli relativi ad attività didattica attinente a corsi universitari, o equivalente, pertinente al SSD CHIM/03 del bando, né a finanziamenti, partecipazioni a congressi e convegni. Dichiara di essere autore di n. 2 brevetti nazionali.

Complessivamente i titoli presentati dal candidato sono valutati come discreti.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Il candidato ha conseguito il titolo di Laurea triennale in Chimica nel 2010 e di Laurea Magistrale in Fotochimica e Materiali Molecolari nel 2012, entrambe con voti 110/110 e lode, presso l'Università di Bologna. Ha ottenuto il titolo di Dottorato di Ricerca in Chimica nel 2016, presso l'Università di Bologna Alma Mater Studiorum, presentando una tesi di argomento "Graphene and semiconductor or metallic nanoparticles for energy conversion". Il candidato non ha svolto attività didattica attinente a corsi universitari, o equivalente, pertinente al SSD CHIM/03 del bando, dichiarando di aver svolto attività per 24 CFU supplementari per l'accesso ai concorsi per l'insegnamento in scuole secondarie.

Il candidato dichiara di essere stato studente visitatore per alcuni mesi (5/2015-8/2015) presso l'Università INRS-EMT di Varennes (Canada), di aver usufruito di un contratto di Post dottorato dal 06/2016-08/2017 presso l'Università di Bologna, di essere titolare di un contratto Post-Doc presso l'Università di Luleå (Svezia) nel periodo 06/09/2017-06/09/2019, e di aver ricoperto il ruolo di ricercatore presso il dipartimento CNR-IMM nel periodo 01/2013-12/2018. Dichiara di aver ottenuto un premio come giovane ricercatore nel 2015 e nel 2017 come migliore tesi di PhD nella Microscopic Science dalla Italian Society for Microscopic Science, e di aver ottenuto altri due premi come miglior tesi di Dottorato in Chimica nell'area di chimica inorganica dall'Università di Bologna, e in Photochemistry (2016) dal gruppo GIF (Gruppo Italiano di Fotochimica). Dichiara inoltre di essere autore di n. 2 brevetti nazionali.

Complessivamente i titoli presentati dal candidato sono valutati come discreti.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

I dati bibliometrici sono stati determinati dalla Commissione in base alla banca dati SCOPUS, dato che quelli forniti dal candidato (Google Scholar) non sono quelli di banche dati riconosciute nelle procedure delle ASN.

1. A. Arrigo, R. Mazzaro, F. Romano, G. Bergamini, and P. Ceroni. Photoinduced Electron-Transfer Quenching of Luminescent Silicon Nanocrystals as a Way to Estimate the Position of the Conduction and Valence Bands by Marcus Theory. Chem. Mater. 2016, 28, 6664-6671. (I.F. 9.466, numero citazioni= 5; Q1)

- **2.** F. Di Maria, A. Zanelli, A. Liscio, A. Kovtun, E. Salatelli, **R. Mazzaro**, V. Morandi, G. Bergamini, A. Shaffer, and S. Rozen. Poly(3-hexylthiophene) Nanoparticles Containing Thiophene-S,S-dioxide: Tuning of Dimensions, Optical and Redox Properties, and Charge Separation under Illumination. ACS Nano, 2017, 11, 1991-1999. (I.F. 13.942, numero citazioni= 5; Q1)
- 3. M. Döbbelin, A. Ciesielski, S. Haar, S. Osella, M. Bruna, A. Minoia, L. Grisanti, T. Mosciatti, F. Richard, E. A. Prasetyanto, L. De Cola, V. Palermo, R. Mazzaro, V. Morandi, R. Light-enhanced liquid-phase exfoliation and current photoswitching in graphene—azobenzene Composites. Nature Communications 2016, 7, 11090 DOI: 10.1038/ncomms11090. (I.F. 13.092, numero citazioni= 23, Q1)
- **4.** G. Guidetti, A. Cantelli, **R. Mazzaro**, L. Ortolani, V. Morandi, and M. Montalti. Tracking graphene by fluorescence imaging: a tool for detecting multiple populations of graphene in solution. Nanoscale, 2016, 8, 8505-8511. DOI: 10.1039/c6nr02193j. (I.F. 7.367, numero citazioni= 2: Q1)
- 5. S. Haar, A. Ciesielski, J. Clough, H. Yang, R. Mazzaro, F. Richard, S. Conti, N. Merstorf, M. Cecchini, V. Morandi, C. Casiraghi, and P. Samorì. A Supramolecular Strategy to Leverage the Liquid-Phase Exfoliation of Graphene in the Presence of Surfactants: Unraveling the Role of the Length of Fatty Acids. Small, 2015, 11, 1691-1702. Cover Picture (I.F. 8.643, numero citazioni= 42; Q1)
- **6.** S. Haar, M. Bruna, J. X. Lian, F. Tomarchio, Y. Olivier, **R. Mazzaro**, V. Morandi, J. Moran, A. C. Ferrari, D. Beljonne, A. Ciesielski, and P. Samorì. Liquid-Phase Exfoliation of Graphite into Single- and Few-Layer Graphene with α-Functionalized Alkanes. J. Phys. Chem. Lett., 2016, 7, 2714-2721. (I.F. 9.353, numero citazioni= 16; Q1)
- 7. C. Lincheneau, M. Amelia, M. Oszajca, A. Boccia, F. D'Orazi, M. Madrigale, R. Zanoni, R. Mazzaro, L. Ortolani, V. Morandi, S. Silvi, K. Szacilowski, and A. Credi. Synthesis and Properties of Type-I ZnTe/ZnS Core/Shell Quantum Dots. J. Mater. Chem. C., 2014, 2, 2877-2885. DOI: 10.1039/c0xx00000x (I.F. 5.256, numero citazioni= 15; Q1)
- **8.** N. Lisi, T. Dikonimos, F. Buonocore, M. Pittori, **R. Mazzaro**, R. Rizzoli, S. Marras & A. Capasso. Contamination-free graphene by chemical vapor deposition in quartz Furnaces. Sci. Rep., 2017, 7, 9927. (I.F. 4.609, numero citazioni= 1, Q1)
- **9. R. Mazzaro**. Nanocristalli di Silicio: una piattaforma funzionale per la costruzione di nanostrutture ibride per la conversione di energia. La Chim. E l'Industria. 2017, 2, 40-46.
- 10. R. Mazzaro, M. Locritani, J. K. Molloy, M. Montalti, Y. Yu, B. A. Korgel, G. Bergamini, V. Morandi, and P Ceroni. Photoinduced Processes between Pyrene-Functionalized Silicon Nanocrystals and Carbon Allotropes. Chem. Mater. 2015, 27, 4390-4397. (I.F. 9.466, numero citazioni= 7, Q1)
- **11. R. Mazzaro**, A. Boni, G. Valenti, M. Marcaccio, F. Paolucci, L. Ortolani, V. Morandi, P. Ceroni, and G. Bergamini. Uniform Functionalization of High-Quality Graphene with Platinum Nanoparticles for Electrocatalytic Water Reduction. ChemistryOpen, 2015, 4, 268-273. DOI: 10.1002/open.201402151. (I.F. 2.918, numero citazioni= 6, Q1)
- **12. R. Mazzaro**, F. Romano, and P. Ceroni. Long-lived luminescence of silicon nanocrystals: from principles to applications. Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, 19, 26507-26526. DOI: 10.1039/c7cp05208a (I.F. 3.906, numero citazioni= 5, Q1)
- **13.** L. Ravotto, **R. Mazzaro**, M. Natali, L. Ortolani, V. Morandi, P. Ceroni, and G. Bergamini. Photoactive Dendrimer for Water Photoreduction: A Scaffold to Combine Sensitizers and Catalysts. J. Phys. Chem. Lett., 2014, 5, 798-803. (I.F. 9.353, numero citazioni = 13, Q1)
- **14.** S. Silvestrini, C. C. De Filippo, N. Vicentini, E. Menna, **R. Mazzaro**, V. Morandi, L. Ravotto, P. Ceroni, and M. Maggini. Controlled Functionalization of Reduced Graphene Oxide Enabled by Microfluidic Reactors. Chem. Mater., 2018, 30, 2905-2914. DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b04740 (I.F. 9.890, numero citazioni= 0; Q1)
- **15.** Y. Yu, G. Fan, A. Fermi, **R. Mazzaro**, V. Morandi, P. Ceroni, D-M. Smilgies, and B. A. Korgel. Size-Dependent Photoluminescence Efficiency of Silicon Nanocrystal Quantum Dots. J. Phys. Chem. C, 2017, 121, 23240-23248. (I.F. 4.484, numero citazioni= 9, Q1)
- **16. R. Mazzaro**, A. Vomiero, The Renaissance of Luminescencent Solar Concentrators: The Role of Nanomaterials. Adv. Energy Mater. 2018, IN PRESS. (pubblicazione non trasmessa)

(*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

A. originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

B. congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 - Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena/parziale/scarsa);

C. rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

D. apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso); **giudizio complessivo (A+B+C+D)** (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo =**BUONO**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO.**

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C =; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = ECCELLENTE.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo =**BUONO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

(non trasmessa, NON VALUTABILE)

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = (IF e quartile non censiti); D = primario; giudizio complessivo = BUONO.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

(non trasmessa, NON VALUTABILE)

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = (IF e quartile non censiti); D = primario; giudizio complessivo =**BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

(non trasmessa, NON VALUTABILE)

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato ha pubblicato i primi articoli scientifici nel 2014. Dichiara di aver pubblicato n. 19 lavori, corrispondenti ad una media di circa 4.75 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor di 139.021 corrispondente ad un valor medio per pubblicazione di 7.316, calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di aver ottenuto un totale di 163 citazioni e numero medio di citazioni per pubblicazione 8.11), che gli consentono di avere un H-index di 7.

Valutazione sulla produzione complessiva

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività scientifica del candidato è principalmente indirizzata alla sintesi, caratterizzazione e studio di nanomateriali con potenziale applicazione nel campo della sensoristica, dell'optoelettronica e nei processi di conversione di conversione di energia. In considerazione del breve periodo di ricerca svolto, la produzione scientifica complessiva si può ritenere buona e sviluppata con originalità e rigore metodologico. Le 15 pubblicazioni presentate sono quasi tutte a diffusione internazionale e di livello molto buono. L'apporto individuale del candidato è chiaramente enucleabile e significativo risultando primo autore in 4 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

COMMISSARIO2: Prof.ssa Adriana Bigi

L'attività di ricerca del candidato è indirizzata allo studio di materiali, e in particolare di nanomateriali e materiali bidimensionali, con potenzialità di applicazioni che spaziano in diversi settori: dall'optoelettronica alla biomedicina, dai sensori ai compositi. L'attività comprende sia la sintesi dei materiali in oggetto sia la loro caratterizzazione, soprattutto per quanto riguarda gli aspetti fotochimici relativi a processi di trasferimento di carica ed energia.

Le 15 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione sono tutte su riviste internazionali ad ampia diffusione nella comunità scientifica e di livello generalmente molto buono, così come l' originalità, la valenza scientifica, e il rigore metodologico. Il candidato è primo autore in n.4 pubblicazioni, pertanto il suo apporto individuale alle 15 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione sia nazionale sia internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo.

La produzione complessiva è buona, considerando il breve periodo intercorso dalla laurea, e svolta con continuità temporale.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

L'attività del candidato si è rivolta in buona parte allo studio delle proprietà di nanomateriali di interesse Inorganico. Si è occupato di aspetti di sintesi e di caratterizzazione, ad esempio la funzionalizzazione e caratterizzazione di nanocristalli di Silicio; dello studio della correlazione tra le proprietà specifiche dei materiali e la loro attività nella prospettiva di una utilizzazione nei processi di conversione d'energia; di aspetti fotochimici coinvolgenti processi di trasferimento di carica ed energia nella prospettiva di trovare materiali attivi di potenziale interesse nell'optoelettronica e come dispositivii fotovoltaici.

La produzione complessiva è significativamente limitata dal breve periodo di ricerca svolto (2014-2018). L'attività è stata sviluppata con continuità temporale. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di quasi tutte le pubblicazioni presentate. L'apporto individuale del candidato alle 15 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione, risulta chiaramente enucleabile e significativo, risultando il candidato primo autore in n.4 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

Il candidato ha conseguito il titolo di Laurea triennale in Chimica nel 2010 (110/110 e lode) e la laurea Magistrale in Fotochimica e Materiali Molecolari nel 2012 (110/110 e lode), presso l'Università degli Studi Alma Mater Studiorum di Bologna. Ha ottenuto il titolo di Dottorato di Ricerca in Chimica nel 2016, presso la stessa università. La sua tesi di dottorato, dal titolo "Graphene and semiconductor or metallic nanoparticles for energy conversion", è stata premiata dall'Università di Bologna (premio Spada), dal GIF- Italian Photochemistry Group e dalla SISM (Italian Society for Microscopic Science). Durante il periodo di dottorato ha trascorso un periodo di ricerca presso l'Università INRS-EMT di Varennes (Canada). Inoltre, dichiara di aver usufruito di un contratto di Post dottorato dal 06/2016-08/2017 presso l'Università di Bologna, di aver ricoperto il ruolo di ricercatore presso il dipartimento CNR-IMM nel periodo 01/2013-12/2018 e di essere attualmente titolare di un contratto Post-Doc presso l'Università di Luleå (Svezia). Il candidato non ha svolto attività didattica attinente a corsi universitari, o equivalente, pertinente al SSD CHIM/03 del bando, e non presenta titoli relativi a finanziamenti e partecipazioni a congressi e convegni. Dichiara di essere autore di n. 2 brevetti nazionali.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è discreto.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6.

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

A = eccellente; B = piena; C = (IF e quartile non censiti); D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

(non trasmessa, NON VALUTABILE)

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività di ricerca del candidato è indirizzata alla sintesi, caratterizzazione e studio di nanomateriali con potenzialità di applicazioni che spaziano in diversi settori: dall'optoelettronica alla biomedicina, dai sensori ai compositi. L'attività comprende sia la sintesi dei materiali in oggetto sia la loro caratterizzazione, soprattutto per quanto riguarda gli aspetti fotochimici relativi a processi di trasferimento di carica ed energia.

In considerazione del breve periodo di ricerca svolto, la produzione scientifica complessiva si può ritenere buona, svolta con continuità temporale e sviluppata con originalità e rigore metodologico. Le 15 pubblicazioni presentate sono quasi tutte a diffusione internazionale e di livello molto buono. L'apporto individuale del candidato è chiaramente enucleabile e significativo risultando primo autore in n. 4 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

CANDIDATO: MELONI Simone

TITOLI PRESENTATI

- **1.** Titolo di studio: Laurea in Chimica conseguita il 17/07/1997 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con votazione 110/110 e lode.
- **2.** Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito 15/11/2000 presso Università di Roma "La Sapienza" (allega certificato)
- Conseguimento Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore di II fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore concorsuale 03/B1, conseguita il 12/04/2017, nella tornata primo quadrimestre abilitazione 2016 (DD 1532 del 29 luglio 2016).
- **4.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di II fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il settore concorsuale: 03/B2.
- **5.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di II fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il settore concorsuale: 03/A2.
- **6.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di II fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il settore concorsuale: 02/B2.
- 7. Lettera di presentazione del Prof. Carlo Massimo. (titolo trasmesso)
- **8.** Lettera di presentazione del Prof. Michael Graetzel. (titolo trasmesso)
- **9.** Lettera di presentazione del Prof. Giovanni Ciccotti. (titolo trasmesso)

ESPERIENZE PROFESSIONALI

10. Contratto di ricercatore a tempo determinato di tipologia A stipulato ai sensi dell'art. 24, comma 3, lett. a) della legge 30 dicembre 2010, n. 240, presso il Dipartimento di Ingegneria meccanica

- ed Aereospaiale (DIMA) dell'Università di Roma "Sapienza" dal 1/12/2016 e tuttora in corso. (titolo trasmesso)
- **11.** Assegno di ricerca presso l'Università di Roma "Sapienza" dal 1/1/2016 al 30/11/2016. (titolo trasmesso)
- 12. analoghi contratti e borse in atenei stranieri in qualità di:
 - Postdoctoral Research Fellow presso L'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH) dal 1/11/2013 al 31/12/2015; (titolo trasmesso)
 - Marie-Curie Research Fellow presso Lo University College Dublin (IE) dal 1/5/2011 al 31/10/2012; (titolo trasmesso)
 - Postdoctoral Research Fellow presso Lo University College Dublin (IE) dal 1/9/2009 al 26/4/2011. (titolo trasmesso)
- **13.** Visiting Research Fellow del Prof. R. Car alla Princeton University, Princeton (NJ, USA) dal 9/1/2001 al 14/3/2001(titolo trasmesso)
- **14.** Visiting PhD Student del Prof. M. Parrinello al Max-Planck-Institut Fur Festkorperforschung, Stuttgart (GE) dal 1/3/1999 al 29/2/2000 (titolo trasmesso)
- **15.** servizio presso il Consorzio per le Applicazioni del Supercalcolo per Universita e Ricerca CASPUR Supercomputing Centre come Permanent Staff Member dal 2/1/2002 al 31/10/2013 (titolo trasmesso)
- 16. servizio presso il Consorzio per le Applicazioni del Supercalcolo per Universita e Ricerca CASPUR Supercomputing Centre come borsista dal 15/3/2001 al 31/12/2001 (titolo trasmesso)

ATTIVITA' DIDATTICA

- **17.** 2016 tuttora Università di Roma "Sapienza" (IT) Corso: (4 crediti 24 ore) "Laboratorio di simulazioni atomistiche e microfluidiche", Laurea Magistrale in Ingegneria delle Nanotecnologie (titolo trasmesso)
- **18.** 2014-2016 Università di Roma "Sapienza" (IT) Corso: (6 crediti 40 ore) "Introduzione alla Bioinformatica", Scuola di Dottorato in Chimica (titolo trasmesso)
- **19.** 2014 École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH) Corso monografico: (4 ore) "Basic quantum-chemistry: the Hartree-Fock method" (titolo trasmesso)
- **20.** 2014 École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH) Tutoring: (24 ore) Corso "Advanced Computational Methods" (titolo trasmesso)
- **21.** 2014 University of Duisburg-Essen (GE) Corso monografico: (3 ore) "A stroll along modern rare event methods: general ideas and derivation of some of the most promising techniques" (titolo trasmesso)
- **22.** 2013 Università di Roma "Sapienza" e "RomaTre" (IT) Corso dottorale: (6 ore) "Studio degli eventi rari attraverso simulazioni al computer" (titolo trasmesso)
- **23.** 2012 University College Dublin (IE) Corso dottorale: (6 ore) "Theory and computational techniques to study rare events in atomistic and molecular simulations." (titolo trasmesso)
- **24.** 2007-2009 Università di Rome "Sapienza" per Erasmus Mundus: ENS Lyon (FR), "Sapienza" Roma (IT), Universiteit van Amsterdam and Vrije Universiteit Amsterdam (NL) Corso: (6 ore) "Molecular Simulations" (titolo trasmesso)
- **25.** 2007-2009 Università di Roma "Sapienza" e "RomaTre" (IT) Corso dottorale: (6 ore + Laboratorio e tutoraggio) "Simulazioni di Eventi Rari" (titolo trasmesso)
- **26.** 2006-2009, 2011 "CASPUR Summer School of Advanced Computing Corso (abilitato per scuole dottorali): (24 ore) "Programmazione Parallela per Applicazioni Scientifiche" (titolo trasmesso)
- **27.** 2003-2018 Coordinamento e supervisione di 17 collaboratori di livello postdottorale o superiore e/o studenti di livello dottorale.

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

- 28. 2012 Premio: Ireland's Champions of EU research (titolo trasmesso)
- 29. 2018 temine finale aperto Visiting Scientist del Daresbury Laboratory Science and Technology Facility Council (STFC), UK (titolo trasmesso)

- **30.** 2018 Offerta posizione come leader del gruppo "Theoretical and Computational Physics" (14 academic staff) dello Science and Technology Facility Council (STFC) declinata (titolo trasmesso)
- **31.** 2018 Articolo "Intrusion and extrusion of a liquid on complex nanostructured surfaces", Giacomello A., Meloni S.*, Casciola C. M., J. Phys.: Condens. Matter 29, 014003 (2017) selezionato per gli "Highlights 2017" del Journal of Physics: Condensed Matter http://iopscience.iop.org/journal/0953-8984/page/Highlights-2017 (titolo trasmesso)
- **32.** 2018 Articolo "Ionic polarization-induced current-voltage hysteresis in CH3NH3PbX3 perovskite solar cells", S. Meloni, T. Moehl, W. Tress, M. Franckevičius, M. Saliba, Y.H. Lee, P. Gao, M. K. Nazeeruddin, S. M. Zakeeruddin, U Rothlisberger, M. Graetzel, Nature Communications 7, 10334 (2016) selezionato come ESI (Essential Science Indicators) "Highly Cited Paper" del database Web of Knowledge: "top one percent in each of the 22 ESI subject areas per year" (titolo trasmesso)
- **33.** 2018 Articolo "Entropic Stabilization of Mixed A-Cation ABX3 Metal Halide Perovskites for High Performance Perovskite Solar Cells", Yi C., Luo J., Meloni S.‡, Boziki A., Ashari-Astani N., Grätzel C, Zakeeruddin S. M., Röthlisberger U., and Grätzel M., Energy and Environmental Science 9, 656 (2016) selezionato come ESI (Essential Science Indicators) "Highly Cited Paper" del database Web of Knowledge: "top one percent in each of the 22 ESI subject areas per year" (titolo trasmesso)
- **34.** 2018 Press release dell'articolo "Self-Recovery Superhydrophobic Surfaces: Modular Design", Lisi E., Amabili M., Meloni S.*, Giacomello A., and Casciola C. M., ACS Nano 12, 359 (2018); Apparso su agenzia stampa (Galileo, AskANews, LinkedIn, Yahoo Notizie); Intervista del. Dr. Meloni su Radio24 nel programma Smart City del 26 Marzo 2018) (titolo trasmesso)
- **35.** 2017 termine finale aperto Membro del Consiglio d'area della Laurea Magistrale in Ingegneria delle nanotecnologie, University of Rome "Sapienza"; Membro della Commissione per la Gestione della Comunicazione e per l'Orientamento (titolo trasmesso)
- **36.** 2017 Chair del simposio "Perovskite Solar Cells" della conferenza internazionale e-MRS Fall Meeting, Varsavia (PL) (titolo trasmesso)
- **37.** 2017 Chair del simposio "Mesoscopic Solar Cells" della 21° Conferenza Internazionale "Solid State Ionics", Padova (IT) (titolo trasmesso)
- **38.** 2016 Invited review article "Focus Article: Theoretical aspect of vapour nucleation on structured surfaces", Meloni S.*, Giacomello A., Casciola C. M., J. Chem. Phys. 145, 211802 (2016); special issue "Nucleation: New Concepts and Discoveries", Kenneth Kelton e Daan Frenkel Eds (titolo trasmesso)
- **39.** 2016 Press release dell'articolo "Ionic polarization-induced current-voltage hysteresis in CH3NH3PbX3 perovskite solar cells", S. Meloni, T. Moehl, W. Tress, M. Franckevičius, M. Saliba, Y.H. Lee, P. Gao, M. K. Nazeeruddin, S. M. Zakeeruddin, U Rothlisberger, M. Graetzel, Nature Communications 7, 10334 (2016) (titolo trasmesso)
- **40.** 2016 Press release dell'articolo "Origin of unusual bandgap shift and dual emission in organic-inorganic lead halide perovskites", Dar M. I., Jacopin G., Meloni S.‡, Mattoni A., Arora N., Boziki A., Zakeeruddin S. M., Röthlisberger U., Graetzel M., Science Advances 2, e1601156 (2016) (titolo trasmesso)
- **41.** 2015 Copertina di Advances Materials Interfaces per l'articolo "Superhydrophobicity: Unraveling the Salvinia Paradox: Design Principles for Submerged Superhydrophobicity", M. Amabili, A. Giacomello, S. Meloni, and C.M. Casciola, Advanced Materials Interfaces 2, 1500248 (2015) (titolo trasmesso)
- **42.** 2014-2015 Swiss Chemical Society
- **43.** 2014 Chair della conferenza internazionale "Superhydrophobicity, Bubble Stability and Heterogeneous Nucleation", Roma (titolo trasmesso)
- **44.** 2014 Editor della "Encyclopedia of Nanotechnology" di Springer, sezione "Molecular Modeling" (titolo trasmesso)
- **45.** 2012-2013 Guest Editor di Molecular Physics (titolo trasmesso)
- **46.** 2012 Invited review article "Theory and methods for rare events", Bonella S., Meloni S.*, Ciccotti G., Eur. Phys. J. B, 85, 97 (2012) (titolo trasmesso)
- **47.** 2012 termine finale aperto Membro del Collegio dei Docenti della Scuola Dottorale in Meccanica Teorica e Applicata dell'Università di Roma "Sapienza" (titolo trasmesso)

FINANZIAMENTI

48. Il candidato presenta documentazione che certifica di aver partecipato come PI a 15 e come componente a10 finanziamenti da bandi nazionali, europei e di Ateneo.

RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- **49.** Il candidato dichiara la partecipazione a 40 congressi nazionali ed internazionale come relatore, di cui 21 come invited speaker.
- **50.** Il candidato presenta documentazione che certifica di essere stato organizzatore di 8 conferenze, congressi e scuole internazionali provvedendo anche al reperimento di fondi per il loro svolgimento.

Valutazione sui titoli

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Dopo il conseguimento della Laurea (V.O.) in Chimica nel 1997 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (110/110 e lode), il candidato ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2000 presso la medesima università.

Il candidato ha ottenuto l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di Il Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per i Settori Concorsuali 03/B1, 03/A2, 03/B2 e 02/B2. L'attività didattica in ambito universitario è modesta e non pertinente al SSD CHIM/03.

Il candidato dichiara di essere stato titolare di tre assegni di ricerca "Post Doc" presso rispettivamente lo University College Dublin (IE), l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH) e l'Università di Roma "La Sapienza"; dichiara inoltre di essere ricercatore RTD-A dal 2016 presso il Dipartimento di Ingegneria meccanica ed Aereospaiale (DIMA) dell'Università di Roma "La Sapienza".

Dichiara di aver trascorso periodi all'estero come "Visiting Scientist" e di aver prestato servizio presso il CASPUR Roma. Il candidato dichiara di aver partecipato sia come PI che come componente complessivamente a 25 progetti di finanziamento nazionali, europei e di ateneo. Il candidato dichiara di aver partecipato a numerosi congressi nazionali ed internazionali di cui 21 come "invited speaker" e di aver organizzato 8 tra conferenze, congressi e scuole internazionali. Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è molto buono.

COMMISSARIO2: Prof.ssa Adriana Bigi

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica nel 1997 con la votazione di 110/110 e Lode, e successivamente il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2000, entrambi presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Nella tornata del 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1. Inoltre, ha ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per i Settori Concorsuali 02/B2, 03/B2, 03/A2. Ha prestato servizio come borsista e poi come permanent staff presso il CASPUR Supercomputing Centre, ha usufruito di alcuni contratti e borse in atenei stranieri, di un assegno di ricerca (01/01/2016 - 30/11/2016) presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". e dal 1/12/2016 è RTDa nel SSD ING-IND/06 presso la stessa Università. Ha tenuto diversi corsi monografici e dottorali sia in Italia sia all'estero, e dal 2016 un corso di 4 crediti per la Laurea Magistrale in Ingegneria delle Nanotecnologie, generalmente indirizzati verso lo studio di tecniche computazionali e simulazione di modelli molecolari, e comunque non pertinenti al SSD CHIM/03. Nel 2012 ha vinto il premio Ireland's Champions of EU research, 2 dei sui articoli sono stati selezionati come "Highly Cited Paper" del database Web of Knowledge, e uno è stato selezionato selezionato per gli "Highlights 2017" del Journal of Physics: Condensed Matter. Nel 2014 è stato Editor della "Encyclopedia of Nanotechnology" di Springer, sezione "Molecular Modeling". Allega n.3 lettere di presentazione. Ha partecipato a numerosi congressi e convegni nazionali e internazionali: in particolare ha presentato n.21 conferenze su invito, ha svolto le funzioni di Chair in 3 congressi e simposi internazionali, e ha contribuito all'organizzazione di n.8 conferenze, Ha inoltre partecipato come PI a n.15 e come componente a n.10 finanziamenti da bandi nazionali, europei e di Ateneo. Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è molto buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Il candidato ha conseguito il diploma di laurea (V.O.) in Chimica nel 1997 presso presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con voto 110/110 e lode ed il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2000 presso la medesima università. La tesi di dottorato non è valutabile in quanto non prodotta dal candidato.

Nel 2017 il candidato ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di II fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1. Ha inoltre conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di II fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/A2 nel 2017 e per i settori concorsuali 03/B2 e 02/B2 nel 2018.

L'attività didattica in ambito universitario è modesta e non è riportato il SSD nell'ambito del quale è stata svolta, comunque non pertinente al SSD CHIM/03 del bando. Dal 2016 ad oggi svolge il corso di "Laboratorio di simulazioni atomistiche e microfluidiche" per la Laurea Magistrale in Ingegneria delle Nanotecnologie presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".

Il candidato dichiara di essere stato titolare di un assegno di ricerca Post Doc (2009-2011 e 2011-2012) presso lo University College Dublin (IE), e presso l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH) (2013-2015). Di essere stato titolore di un assegno di ricerca (2016) presso l'Università di Roma "La Sapienza"; dichiara inoltre di essere ricercatore RTD-A dal 2016 presso il Dipartimento di Ingegneria meccanica ed Aereospaiale (DIMA) dell'Università di Roma "La Sapienza". Dichiara di aver trascorso periodi all'estero come visiting scientist e di prestato servizio presso il Consorzio per le Applicazioni del Supercalcolo per Universita e Ricerca-CASPUR Supercomputing Centre. Il candidato dichiara di aver partecipato come PI a n.15 e come componente a n.10 finanziamenti nazionali, europei e di ateneo.

Il candidato dichiara di aver partecipato a n. 40 congressi nazionali ed internazionali di cui 21 come invited speaker e di essere stato organizzatore di n. 8 tra conferenze, congressi e scuole internazionali. Trasmette tre lettere di presentazione. Il candidato è membro della Swiss Chemical Society. Presenta un premio europeo e diversi riconoscimenti su alcuni degli articoli di cui è coautore. Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Sono stati considerati i dati bibliometrici forniti dal candidato e presi dalla banca dati SCOPUS.

- 1. Caddeo C., Saba M. I., **Meloni S**., Filippetti A., and Mattoni A. Collective Molecular Mechanisms in the CH3NH3Pbl3 Dissolution by Liquid Water. ACS Nano, 11, 9183 (2017). (I.F. 13.493, numero citazioni= 3; Q1).
- 2. Dar M. I., Jacopin G., **Meloni S.**, Mattoni A., Arora N., Boziki A., Zakeeruddin S. M., Röthlisberger U., Graetzel M. Origin of unusual bandgap shift and dual emission in organic-inorganic lead halide perovskites. Science Advances. 2, e1601156 (2016). (IF 11.511, numero citazioni= 57, Q1).
- **3.** Tress W., Beyer B., Ashari Astani N., Gao F., **Meloni S.**, Rothlisberger S. Extended intermolecular Interactions Governing Photocurrent-Voltage Relations in Ternary Organic Solar Cells. J. Phys. Chem. Lett. **7**, 3936 (2016). (IF 9.353, numero citazioni= 0, Q1).
- **4. Meloni S.**, Palermo G., Ashari Astani N., Grätzel M., Roethlisberger U. Valence and conduction band tuning in halide perovskites for solar cells applications. J. Mat. Chem. A 4, 15997 (2016). (IF 8.867, numero citazioni= 15, Q1).
- **5. Meloni**, T. Moehl, W. Tress, M. Franckevičius, M. Saliba, Y.H. Lee, P. Gao, M. K. Nazeeruddin, S. M. Zakeeruddin, U Rothlisberger, M. Graetzel. Ionic polarization-induced current-voltage hysteresis in CH3NH3PbX3 perovskite solar cells". Nat. Comm. **7**, 10334 (2016). (IF 12.124, numero citazioni= 183, Q1).

- **6.** Yi C., Luo J., **Meloni S.**, Boziki A., Ashari-Astani N., Grätzel C., Zakeeruddin S. M., Röthlisberger U., and Grätzel M. Entropic Stabilization of Mixed A-Cation ABX3 Metal Halide Perovskites for High Performance Perovskite Solar Cells. Energy and Environmental Science 9, 656 (2016). (IF 29.518, numero citazioni= 263, Q1).
- 7. Ashari-Astani N., Meloni S., Salavati A. H., Palermo G., M Grätzel M., and Rothlisberger U. Computational Characterization of the Dependence of Halide Perovskite Effective Masses on Chemical Composition and Structure. J. Phys. Chem. C 121, 23886 (2017). VALUTABILE), (IF 4.536, numero citazioni= 2, Q1).
- **8.** Lisi E., Amabili M., **Meloni S.***, Giacomello A., and Casciola C. M. Self-Recovery Superhydrophobic Surfaces: Modular Design. ACS Nano 12, 359 (2018). (IF 13.942, numero citazioni= 3, Q1).
- **9.** Giacomello A., Chinappi M., **Meloni S**., Casciola C. M. Metastable wetting on superhydrophobic surfaces: continuum and atomistic views of the Cassie–Baxter/Wenzel transition. Phys. Rev. Lett., 109, 226102 (2012). (IF 7.943, numero citazioni= 70, Q1).
- **10.** Giacomello A., **Meloni S.***, Chinappi M., Casciola C. M. Cassie-Baxter and Wenzel States on a Nanostructured Surface: Phase Diagram, Metastabilities, and Transition Mechanism by Atomistic Free Energy Calculations. Langmuir, 28, 10764 (2012). (IF 4.187, numero citazioni= 80, Q1).
- **11.** Giacomello A., **Meloni S.** *, Mueller M., Casciola C. M. Mechanism of the Cassie-Wenzel transition via the atomistic and continuum string methods. J. Chem. Phys. 142, 104701 (2015). (IF 2.894, numero citazioni= 19, Q1).
- **12.** Lauricella M., **Meloni S.***, English N. J., Peters B., Ciccotti G. Methane Clathrate Hydrate Nucleation Mechanism by Advanced Molecular Simulations. J. Phys. Chem. C, 118, 22847 (2014). (IF 4.772, numero citazioni= 40, Q1).
- **13.** Lauricella M., **Meloni S.***, Liang S., English N. J., Kusalik P. G., Ciccotti G. Clathrate structure-type recognition: application to hydrate nucleation and crystallisation. J. Chem. Phys. 142, 244503 (2015). (IF 2.894, numero citazioni= X, 12, Q1).
- **14.** English N., Lauricella M., **Meloni S.** Massively parallel molecular dynamics simulation of formation of clathrate-hydrate precursors at planar water-methane interfaces: insights into heterogeneous nucleation. J. Chem. Phys. 140, 204714 (2014). (IF 2.952, numero citazioni= 30, Q1).
- **15.** Sterpone F., Bonella S., **Meloni S.*** Early Stage of the Dehydrogenation of NaAlH4 by Ab Initio Rare Event Simulations. J. Phys. Chem. C, 116,19636 (2012). (IF 4.814, numero citazioni= 12, Q1).
- **16.** Lucid J., **Meloni S.***, McKernan D., Spohr E., Ciccotti G. Probing the Structures of Hydrated Nafion in Different Morphologies Using Temperature-Accelerated Molecular Dynamics Simulations. J. Phys. Chem. C, 117, 774 (2013). (IF 4.835, numero citazioni= 12, Q1).
 - (*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

- **A.** originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);
- **B.** congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena/parziale/scarsa);
- **C.** rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);
- **D.** apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso);

giudizio complessivo (A+B+C+D) (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo =**BUONO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo =**OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B =parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO.**

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = Parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo =**BUONO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo =**BUONO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo =**BUONO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = parziale; C: eccellente; D: primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato ha pubblicato il primo articolo scientifico nel 1998. Dichiara di aver pubblicato n. 58 lavori corrispondente ad una media di circa 2.9 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor 253.994 corrispondente ad valore medio per pubblicazione di 4.379 calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di avere ottenuto un totale di 1343 citazioni (numero medio di citazioni per pubblicazione 23.15) che gli consentono di avere un H-index di 18.

Valutazione sulla produzione complessiva

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività scientifica del candidato è prevalentemente di carattere teorico-simulativo indirizzata allo sviluppo di modelli computazionali per lo studio e la comprensione di transizioni di fase e cristallizzazione di sistemi complessi, bagnabilità di superfici superidrofobiche, processi di intrusione e estrusione da materiali liofobici, progettazione e caratterizzazione di materiali per la produzione e l'immagazzinamento di energia. La produzione scientifica del candidato, anche se scarsamente congruente con il SSD CHIM/03, si è sviluppata con continuità temporale e in termini di originalità e rigore metodologico risulta essere molto buona come evidenziato del numero medio di citazioni per ciascuna delle pubblicazioni e la collocazione editoriale di prestigio delle riviste tutte a diffusione internazionale. Il candidato risulta essere primo autore o autore di riferimento in 9 delle 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione risultando pertanto il suo apporto individuale chiaramente enucleabile e significativo.

Il qiudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

COMMISSARIO2: Prof.ssa Adriana Bigi

L'attività scientifica del candidato, prevalentemente di carattere teorico e computazionale, comprende lo sviluppo e caratterizzazione di materiali per la produzione e l'immagazzinamento di energia, lo studio di transizione di fase e cristallizzazione di sistemi complessi, materiali superidrofobici e liofobici,

Le 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione sono tutte su riviste internazionali ad ampia diffusione nella comunità scientifica e di livello generalmente buono o molto buono, cosi come l' originalità, la valenza scientifica, e il rigore metodologico. Il candidato risulta autore di riferimento o primo autore in 9 delle 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione, tutte in collaborazione sia nazionale sia internazionale, e il suo apporto individuale risulta chiaramente enucleabile e significativo.

Il candidato ha pubblicato con continuità dal 1998 e la consistenza scientifica della produzione complessiva è molto buona, anche se scarsamente congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

L'attività scientifica del candidato incentrata sui metodi computazionali è focalizzata nel campo della modellizzazione teorica e computazionale di reazioni in fase condensata, dinamica molecolare, simulazione di superfici e materiali con diverse caratteristiche e applicazioni. Recentemente il candidato ha iniziato ad interessarsi alla modellizzazione di semiconduttori per energetica e fotonica, mentre in anni precedenti la produzione scientifica era prevalentemente orientata al settore della fisica molecolare e applicata.

La produzione scientifica del candidato risulta scarsamente congruente con il SSD CHIM/03 del bando. La consistenza scientifica della produzione complessiva è molto buona, sviluppata con continuità temporale. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di tutte le pubblicazioni presentate e nel buon numero di citazioni ottenute. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta significativo, risultando il candidato primo autore o autore di riferimento in 9 delle 16 pubblicazioni presentate.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica nel 1997 con la votazione di 110/110 e Lode, e successivamente il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2000, entrambi presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Nella tornata del 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di Il Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1. Inoltre, ha

conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per i Settori Concorsuali 02/B2, 03/B2, 03/A2. Dichiara di aver trascorso periodi all'estero come "Visiting Scientist" e di aver prestato servizio come borsista e poi come permanent staff presso il CASPUR Supercomputing Centre. Il candidato dichiara di essere stato titolare di tre assegni di ricerca "Post Doc" presso rispettivamente lo University College Dublin (IE), l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH) e l'Università di Roma "La Sapienza"; dichiara inoltre di essere ricercatore RTD-A dal 2016 presso il Dipartimento di Ingegneria meccanica ed Aereospaiale (DIMA) dell'Università di Roma "La Sapienza". L'attività didattica in ambito universitario è modesta e non pertinente al SSD CHIM/03.

Nel 2012 ha vinto il premio Ireland's Champions of EU research, 2 dei sui articoli sono stati selezionati come "Highly Cited Paper" del database Web of Knowledge, e uno è stato selezionato selezionato per gli "Highlights 2017" del Journal of Physics: Condensed Matter. Nel 2014 è stato Editor della "Encyclopedia of Nanotechnology" di Springer, sezione "Molecular Modeling". Allega n.3 lettere di presentazione. Il candidato dichiara di aver partecipato a numerosi congressi e convegni nazionali e internazionali di cui 21 come "invited speaker" e di aver organizzato 8 tra conferenze, congressi e scuole internazionali. Ha inoltre partecipato come PI a n.15 e come componente a n.10 finanziamenti da bandi nazionali, europei e di Ateneo. Il candidato è membro della Swiss Chemical Society. Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è molto buono.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO.**

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **DISCRETO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = scarsa; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo =**BUONO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = parziale; C: eccellente; D: primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = scarsa; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività scientifica del candidato è prevalentemente di carattere teorico-simulativo indirizzata allo sviluppo di modelli computazionali per lo studio e la comprensione di transizioni di fase e cristallizzazione di sistemi complessi, bagnabilità di superfici superidrofobiche, processi di intrusione e estrusione da materiali liofobici, progettazione e caratterizzazione di materiali per la produzione e l'immagazzinamento di energia.

La produzione scientifica del candidato si è sviluppata con continuità temporale e in termini di originalità e rigore metodologico risulta essere molto buona, come evidenziato dal numero medio di citazioni per ciascuna delle pubblicazioni e la collocazione editoriale di prestigio delle riviste tutte a diffusione internazionale. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, risultando il candidato primo autore o autore di riferimento in 9 delle 16 pubblicazioni presentate. Il candidato ha pubblicato con continuità dal 1998 e la consistenza scientifica della produzione complessiva è molto buona, anche se scarsamente congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina

TITOLI PRESENTATI

- **1.** Titolo di studio: Laurea in Chimica conseguito il 21/09/2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con votazione di 110/110 e lode.
- **2.** Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, conseguito il 17/12/2009 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
- **3.** Titolo della Tesi: A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration. (titolo trasmesso).
- **4.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1, conseguita il 01/12/2014. Si allega il giudizio della commissione nazionale.
- **5.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/A2, conseguita il 03/08/2017. Si allega il giudizio della commissione nazionale.
- **6.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore di Il Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1, conseguita il 07/08/2018. Si allega il giudizio della commissione nazionale.
- 7. Partecipazione a corsi di perfezionamento post-lauream:

- Partecipazione al corso: "Understanding Molecular Simulations". 7-18 Gennaio 2008.
 Università di Amsterdam. Amsterdam
- Partecipazione al corso: "Ottimizzazione di codici scientifico-tecnici." 17-19 Marzo 2009. CASPUR. Roma.
- Partecipazione al corso: "Introduzione all'HPC: calcolo parallelo". 12-14 Maggio 2009. CASPUR. Roma.
- Partecipazione al corso: "Scripting in Python". 25-28 Ottobre 2011. CASPUR. Roma.
- **8.** Lettera di presentazione della Prof.ssa Paola D'Angelo del Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". (titolo trasmesso)
- 9. Incarichi:
- 2011-2018: Rappresentante degli Assegnisti nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". (titolo dichiarato)
- 2009: Rappresentante dei Dottorandi di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". (titolo dichiarato)

ESPERIENZE PROFESSIONALI

- **10.** 01/03/2010 28/02/2011Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **11.** 01/03/2011 29/02/2012 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **12.** 01/03/2012 28/02/2013 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **13.** 01/03/2013 28/02/2014 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **14.** 01/03/2014 28/02/2015 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **15.** 01/03/2015 29/02/2016 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **16.** 01/03/2016 28/02/2017 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **17.** 01/03/2017 28/02/2018 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)
- **18.** 01/03/2018 Dipartimento di Chimica, Università egli studi di Roma "La Sapienza" Assegnista di Ricerca (titolo dichiarato)

ATTIVITA' DIDATTICA

- **19.** 2006/2007 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **20.** 2006/2007 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico-integrative, propedeutiche e di recupero (titolo dichiarato)
- **21.** 2007/2008 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **22.** 2008/2009 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- 23. 2009/2010 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **24.** 2010/2011 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **25.** 2011 Centro di editoria, orientamento e formazione universitaria CISU. Didattica per la preparazione di esami universitari di Fisica (titolo dichiarato)

- **26.** 2011/2012 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **27.** 2012/2013 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **28.** 2013/2014 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- 29. 2014/2015 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **30.** 2012/ancora in corso Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Assistente nella Supervisione di tesi di Laurea magistrale e triennale in chimica e nella supervisione di dottorandi di ricerca (in particolare di 2 dottorandi di ricerca, 5 lauree magistrali e 8 lauree triennali) (titolo dichiarato)
- **31.** 2015/2016 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **32.** 2016/2017 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)
- **33.** 2017/2018 Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Roma "La Sapienza" Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (II anno Laurea triennale in Chimica) (titolo dichiarato)

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

- **34.** L'articolo "Hydration Properties of the Bromide Aqua Ion: the Interplay of First Principle and Classical Molecular Dynamics, and X-ray Absorption Spectroscopy", (P. D'Angelo, V. Migliorati, L. Guidoni, Inorg. Chem. 2010, 49, 4224) è stato seleziato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli ESRF HIGHLIGHTS 2010. (titolo dichiarato)
- **35.** 2015 L'articolo "The non-octarepeat copper binding site of the prion protein is a key regulator of prion conversion" (G. Giachin, P.T. Mai, T.H. Tran, G. Salzano, F. Benetti, V. Migliorati, A. Arcovito, S. della Longa, G. Mancini, P. D'Angelo, G. Legname, Sci Rep. 5, 15253, 2015) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron RadiationFacility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli ESRF HIGHLIGHTS 2015. (titolo dichiarato)
- **36.** 2017 L'articolo "How Does CellI Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study" (A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo, Chem. Eur. J. 23, 8424, 2017) è stato selezionato per la pubblicazione dell'Inside Back Cover (DOI: 10.1002/chem.201701561) dalla rivista Chemistry a European Journal. (titolo dichiarato)
- 37. 2017 L'articolo "Following a chemical reaction on the millisecond time scale by simultaneous X-ray and UV/Vis spectroscopy" (G. Olivo, A. Barbieri, V. Dantignana, F. Sessa, V. Migliorati, M. Monte, S. Pascarelli, T. Narayanan, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, P. D'Angelo, J. Phys. Chem. Lett. 8, 2958, 2017) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli Spotlight on Science. (titolo dichiarato)

ATTIVITA' DI PEER REVIEW

38. La candidata dichiara di svolgere dal 2012 attività di Referee per diverse riviste scientifiche internazionali dell'American Chemical Society, dell'American Institute of Physics, di Elsevier e della Royal Society of Chemistry, tra le quali: Inorganic Chemistry, Journal of Physical

Chemistry, the Journal of Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Molecular Liquids, Catalysis Science & Technology, Nanoscale e Journal of Chemical Information and Modeling.

FINANZIAMENTI

39. La candidata dichiara di aver partecipato a 11 finanziamenti da bandi di Ateneo o CASPUR, di cui 4 come PI e 7 come componente.

RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

40. La candidata dichiara la partecipazione a 13 congressi nazionali ed internazionali di cui 1 come invited speaker, 4 con comunicazione orale e 7 con presentazioni di poster.

Valutazione sui titoli

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

La candidata ha conseguito il diploma di laurea in Chimica nel 2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (110/110 e lode) ed il dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2009 presso la medesima università con una tesi dal titolo "Combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration".

La candidata ha ottenuto l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per i Settori Concorsuali 03/B1 (nel 2014 e 2018), e 03/A2 (nel 2017).

La candidata ha svolto attività didattica in ambito universitario, in particolare lezioni di Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II della Laurea triennale in Chimica, non pertinente con il SSD CHIM/03.

La candidata dichiara di aver seguito alcuni corsi di perfezionamento post-laurea inerenti metodi di calcolo, e di essere stata titolare di assegni di ricerca annuali dal 2010 al 2018. La candidata dichiara aver partecipato a numerosi progetti di Ateneo o CASPUR di cui 4 come PI. La candidata dichiara di aver partecipato a congressi nazionali ed internazionali di cui uno come "invited speaker" e 4 come oratore.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

La candidata ha conseguito la laurea in Chimica nel 2006 con la votazione di 110/110 e Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", dove successivamente ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (titolo della tesi di dottorato: "Combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration") nel 2009. Ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1 nel 2014 e successivamente nel 2018, e per il Settore Concorsuale 03/A2 nel 2018. Ha partecipato a diversi corsi di perfezionamento post-lauream. Ha usufruito di 9 assegni di ricerca annuali, di cui uno attualmente in corso, presso l'Università di Roma "La Sapienza". Nella stessa Università dal 2006 ha svolto con continuità Lezioni di Esercitazioni del Corso di Chimica Fisica II per la Laurea triennale in Chimica: non presenta invece attività didattica nel settore SSD CHIM/03. 2 dei sui articoli sono stati inclusi negli ESRF HIGHLIGHTS e 1 negli Spotlight on Science. Dichiara di aver seguito 4 corsi di perfezionamento inerenti metodi di calcolo. Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche e ha partecipato a congressi e convegni nazionali e internazionali, presentando 7 poster e 4 comunicazioni orali, di cui 1 su invito. Ha inoltre partecipato a 11 progetti finanziati da bandi di Ateneo o CASPUR, di cui 4 come Pl. Allega una lettera di presentazione, Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

La candidata ha conseguito il diploma di laurea in Chimica nel 2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con voto di 110/110 e lode ed il dottorato di ricerca in Scienze Chimiche

nel 2009 presso la medesima università con una tesi dal titolo "Combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration".

Nel 2014 e nel 2018 la candidata ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1. Nel 2017 ha conseguito inoltre l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/A2.

La candidata ha svolto attività didattica in ambito universitario non pertinente con il SSD CHIM/03, svolgendo lezioni di Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II della Laurea triennale in Chimica. La candidata dichiara di aver seguito n. 4 corsi di perfezionamento post-laurea di cui uno presso l'Università di Amsterdam e tre presso il centro di calcolo CASPUR di Roma, inerenti metodi di calcolo. Dichiara di essere stata titolare di n. 8 assegni di ricerca annuali dal 2010 al 2018 presso il Dipartimento di chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", e di essere attualmente titolare di un assegno di ricerca presso lo stesso dipartimento. La candidata dichiara aver partecipato a n. 11 progetti di ateneo o CASPUR di cui 4 come PI. La candidata dichiara il riconoscimenti a livello internazionale per quattro delle pubblicazioni di cui è coautrice e dichiara inoltre di aver partecipato a congressi nazionali ed internazionali di cui uno come invited speaker e 4 come oratore.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Sono stati considerati i dati bibliometrici forniti dalla candidata e presi dalla banca dati SCOPUS

- V. Migliorati*, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo. Structure of Water in Zn2+ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017). (IF 4.700, numero citazioni= 2, Q1).
- 2. **V. Migliorati***, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo. *Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water I*NORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). (IF 4.700, numero citazioni= 10, Q1).
- 3. **V. Migliorati***, P. D'Angelo. *Unraveling the Sc3+ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule* INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016). (IF 4.857, numero citazioni= 8, Q1).
- 4. A. Serva, **V. Migliorati***, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. *Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight* PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). (IF 4.123, numero citazioni= 10, Q1).
- 5. F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, **V. Migliorati***. *The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs* JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015). (IF 3.187, numero citazioni= 11, Q1).
- 6. **V. Migliorati***, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo. *Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study* PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015). (IF 4.449, numero citazioni= 20, Q1).
- 7. **V. Migliorati***, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo. Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015). (IF 4.449, numero citazioni= 21, Q1).
- 8. **V. Migliorati***, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. *Unraveling halide hydration: A high dilution approach* JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). (IF 2.952, numero citazioni= 30, Q1).
- 9. **V. Migliorati***, P. D'Angelo *A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg2+ ion solvation properties in methanol solution* RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). (IF 3.708, numero citazioni= 12, Q1).

- 10. **V. Migliorati***, A. Zitolo, P. D'Angelo. *Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures.* 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). (IF 3.377, numero citazioni= 34, Q1).
- P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati*. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). (IF 3.377, numero citazioni= 31, Q1).
- 12. **V. Migliorati***, M. Mancini, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, P. D'Angelo. *Hydration properties of the Zn2+ ion in water at high pressure* INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1141-1150 (2013). (IF 4.794, numero citazioni= 27, Q1).
- 13. V. Migliorati*, P. Ballirano, L. Gontrani, R. Caminiti. *Crystal polymorphism of hexylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water* JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 116, 2104-2113 (2012). (IF 3.607, numero citazioni= 19, Q1).
- 14. **V. Migliorati***, A. Zitolo, G. Chillemi, P. D'Angelo. *Influence of the second coordination shell on the XANES spectra of Zn(II) ion in water and methanol* CHEMPLUSCHEM, 77, 234-239 (2012). (IF: 3.242 (è riferito all'anno 2013 poiché l'IF relativo al 2012 non è disponibile), numero citazioni= 23, Q2).
- 15. **V. Migliorati***, G. Chillemi, P. D'Angelo. *On the Solvation of the Zn2+ Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach* INORGANIC CHEMISTRY, 50, 8509-8515 (2011). (IF 4.601, numero citazioni= 23, Q1).
- V. Migliorati*, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo. Effect of the Zn2+ and Hg2+ lons on the Structure of Liquid Water JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 115, 4798-4803 (2011). (IF 2.946, numero citazioni= 30, Q1).
 (*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

A. originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

B. congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 - Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena, parziale scarsa);

C. rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

D. apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso); **giudizio complessivo (A+B+C+D)** (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B =piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B =piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata ha pubblicato i primi articoli scientifici nel 2008. Dichiara di aver pubblicato n. 48 lavori, corrispondenti ad una media di circa 4.8 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor di 175.131 corrispondente ad un valore medio per pubblicazione di 3.807 calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di aver ottenuto un totale di 951 citazioni (numero medio di citazioni per pubblicazione 19.81) che le consentono di avere un H-index di 20.

Valutazione sulla produzione complessiva: (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività di ricerca della candidata è principalmente rivolta allo studio delle interazioni di ioni metallici con acqua, liquidi ionici, solventi organici, oltre che allo studio di liquidi ionici puri e loro miscele con acqua attraverso la combinazioni di simulazione di dinamica molecolare e misure di assorbimento di raggi X (XAS). La produzione scientifica è molto buona, abbastanza congruente con il SSD CHIM/03, originale e sviluppata con rigore metodologico e continuità temporale. Le pubblicazioni sono di livello molto buono su riviste ad ampia diffusione internazionale e ricadute sulla comunità scientifica di riferimento accettabili sulla base delle citazioni ricevute. Il contributo personale è rilevante, come evidenziato dal fatto che la candidata è autore di riferimento in tutte le pubblicazioni presentate ai fini della valutazione.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva della candidata è molto buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

L'attività di ricerca della candidata si basa approcci combinati di simulazioni di Dinamica Molecolare (DM) e tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) e la diffrazione dei raggi X per lo studio di soluzioni acquose di ioni metallici, di liquidi ionici puri e in miscele con acqua, e di interazioni soluto solvente coinvolgenti ioni metallici in solventi organici e in liquidi ionici.

Le 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione, tutte in collaborazione per lo più in ambito nazionale, sono su riviste internazionali ad ampia diffusione nella comunità scientifica e di livello generalmente buono. Buona anche l'originalità, la valenza scientifica, e il rigore metodologico. La candidata ha contribuito significativamente alle pubblicazioni presentate, come si evince dal fatto che risulta autore di riferimento in tutte. La consistenza scientifica della produzione complessiva della candidata è molto buona, sviluppata con continuità temporale, e in generale congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva della candidata è molto buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

L'attività di ricerca della candidata è incentrata prevalentemente sullo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati attraverso approcci integrati innovativi, che combinano simulazioni di Dinamica Molecolare (DM) e diverse tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) e la diffrazione dei raggi X. I suoi interessi scientifici abbracciano diversi campi della Chimica Inorganica e della Chimica Fisica, come lo sviluppo di campi di forza classici attraverso calcoli ab initio, lo studio di soluzioni acquose di ioni metallici, lantanidi ed alogenuri mediante simulazioni di Dinamica Molecolare ab initio o classica in combinazione con i dati sperimentali XAS, lo studio di liquidi ionici puri e in miscele con acqua e l'indagine delle proprietà di solvatazione di ioni metallici in solventi organici ed in liquidi ionici.

La produzione scientifica della candidata risulta in generale congruente con il SSD CHIM/03 del bando. La consistenza scientifica della produzione complessiva è molto buona, sviluppata con continuità temporale. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di tutte le pubblicazioni presentate e nel buon numero di citazioni ottenute. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta significativo, risultando il candidato autore di riferimento in tutte le 16 pubblicazioni presentate.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva della candidata è molto buono.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

La candidata ha conseguito il diploma di laurea in Chimica nel 2006 con la votazione di 110/110 e Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", dove successivamente ha conseguito il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (titolo della tesi di dottorato: "Combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration") nel 2009. La candidata ha ottenuto l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per i Settori Concorsuali 03/B1 (nel 2014 e 2018), e 03/A2 (nel 2017) La candidata dichiara di aver seguito alcuni corsi di perfezionamento post-laurea inerenti metodi di calcolo, e di essere stata titolare di n. 9 assegni di ricerca annuali dal 2010 al 2018.presso l'Università di Roma "La Sapienza". La candidata ha svolto attività didattica in ambito universitario, in particolare lezioni di Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II della Laurea triennale in Chimica, non pertinente con il SSD CHIM/03.

2 dei suoi articoli sono stati inclusi negli ESRF HIGHLIGHTS e 1 negli Spotlight on Science. Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche e ha partecipato a congressi e convegni nazionali e internazionali di cui uno come "invited speaker" e 4 come oratore. La candidata dichiara di aver partecipato a 11 progetti finanziati da bandi di Ateneo o CASPUR, di cui 4 come PI. Allega una lettera di presentazione, Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è buono.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B =piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività di ricerca della candidata è principalmente rivolta allo studio delle interazioni di ioni metallici con acqua, liquidi ionici, solventi organici, oltre che allo studio di liquidi ionici puri e loro miscele con acqua attraverso la combinazioni di simulazione di dinamica molecolare e tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) e la diffrazione dei raggi X La produzione scientifica è molto buona, abbastanza congruente con il SSD CHIM/03, originale e sviluppata con rigore metodologico e continuità temporale. Le pubblicazioni sono di livello molto

buono su riviste ad ampia diffusione internazionale e ricadute sulla comunità scientifica di riferimento accettabili sulla base delle citazioni ricevute. Il contributo personale è rilevante, come si evince dal fatto che la candidata risulta autore di riferimento in tutte le 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva della candidata è molto buono.

CANDIDATA: NAVARRA Maria Assunta

TITOLI PRESENTATI

- 1. Titolo di studio: Laurea in Chimica conseguito il 20/02/2002 presso la Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con votazione di 110/110 e lode.
- 2. Dottorato di Ricerca in Scienza dei materiali, conseguito il 26/01/2006 presso la Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
- **3.** Titolo della Tesi: Study of electrolytic and electrodic materials for low temperature fuel cell applications (titolo dichiarato).
- **4.** 2002 Università degli Studi di Roma "La Sapienza Esame di stato per l'abilitazione alla professione di Chimico. VALUTABILE
- Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1, conseguita il 07/08/2018 (con trasmissione giudizi). VALUTABILE
- 6. Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di I Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1, conseguita il 07/08/2018 (con trasmissione giudizi). VALUTABILE
- 7. Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/A2, conseguita il 31/07/2018. VALUTABILE
- **8.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di I Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/A2, conseguita il 31/07/2018. VALUTABILE
- Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/A2, conseguita il 01/12/2014. VALUTABILE
- 10. Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B2, conseguita il 07/10/2014. VALUTABILE
- **11.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B2, conseguita il 17/02/2014. VALUTABILE
- **12.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/A2, conseguita il 29/01/2014. VALUTABILE

ESPERIENZE PROFESSIONALI

- **13.** Luglio 2002-Gennaio 2003 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Titolare di un Contratto di Collaborazione Coordinata e Continuativa per attività di ricerca su celle a combustibile a bassa temperatura. (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **14.** Novembre 2002-Ottobre 2005 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Dottoranda con borsa in Scienza dei Materiali, XVIII ciclo. VALUTABILE
- **15.** Ottobre 2005-Ottobre 2006 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Titolare di un Contratto di Collaborazione a Progetto, finanziato da Filas S.p.A. su un

- progetto dal titolo "Sviluppo e Ingegnerizzazione di un processo per il recupero e la valorizzazione di pile alcaline esauste". (titolo dichiarato) VALUTABILE
- 16. Novembre 2006-Dicembre 2006 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Titolare di una Borsa di Studio finanziata da Elettrochimica ed Energia sul tema "Studio di membrane protoniche composite per applicazioni in celle a combustibile". (titolo dichiarato) VALUTABILE
- 17. Gennaio 2007- Dicembre 2008 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Titolare di un Assegno di Ricerca sul progetto "Sviluppo di membrane protoniche e configurazioni elettrodiche innovative per celle a combustibile PEMFC". (titolo dichiarato). VALUTABILE
- **18.** Gennaio 2009-Dicembre 2009 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Titolare di una Borsa di Studio sul progetto "Nuovi materiali anodici ed elettrolitici per batterie litio-ione". (titolo dichiarato). VALUTABILE
- 19. Gennaio 2010-Dicembre 2012 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Ricercatore a Tempo Determinato (art. 1, comma 14, della Legge 4 novembre 2005, n. 230). Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02 Chimica Fisica. Titolo del programma di ricerca "Batterie innovative al litio per accumulo di energia da fonti rinnovabili e trasporto su strada sostenibile", responsabile Prof. Bruno Scrosati. (Biennio 2010-2011 a valere sui fondi dell'omonimo progetto di ricerca 3 finanziato da ENI SpA; anno 2012 a valere sui fondi del 7th EU Framework Programme, Progetto APPLES "Advanced, High Performance, Polymer Lithium batteries for Electrochemical Storage" (titolo dichiarato). VALUTABILE
- **20.** Febbraio 2013-Gennaio 2014 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Titolare di un Assegno di Ricerca sul progetto: "Preparazione e sviluppo di elettroliti gelificati per batterie litio-ione avanzate" (titolo dichiarato) VALUTABILE
- 21. Febbraio 2014 oggi Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Chimica. Ricercatore a Tempo Determinato di tipologia A (art. 24, comma 3, lett. a), della Legge 30 dicembre 2010, n. 240), tempo pieno. Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02 Chimica Fisica. Titolo del programma di ricerca "Sviluppo di materiali elettrolitici ed elettrodici per accumulatori litio ione ad elevata densità energetica", responsabile Prof.ssa Stefania Panero. (Triennio 2014-2017 a valere sui fondi del progetto EU FP7 2012-GC-MATERIALS dal titolo "LISSEN Lithium Sulfur Superbattery Exploiting Nanotechnology"; biennio di proroga finanziato al 72.5% dall'Ateneo di Roma "La Sapienza" e per il restante 27.5% dal suddetto progetto LISSEN. (titolo dichiarato). VALUTABILE
- **22.** Marzo 2003-Aprile 2003 Chalmers University of Technology, Göteborg, Svezia. Dottoranda visitatrice per lo studio di elettroliti polimerici tramite Spettroscopia Raman e IR. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- 23. Maggio 2003-Giugno 2003 CNR ITAE, Messina, Italia Dottoranda visitatrice per la caratterizzazione di materiali elettrolitici in celle a combustibile ad idrogeno e metanolo diretto. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- **24.** Novembre 2003-Dicembre 2003 Chalmers University of Technology, Göteborg, Svezia. Dottoranda visitatrice per lo studio di elettroliti polimerici tramite Spettroscopia Raman e IR. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- **25.** Gennaio 2005- Febbraio 2005 Hunter College of City University of New York (CUNY), New York City, USA. Dottoranda visitatrice per lo studio dei processi di Diffusione e Rilassamento in elettroliti polimerici tramite NMR allo stato solido. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- **26.** Febbraio 2005-Giugno 2005 Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA. Dottoranda visitatrice per la caratterizzazione di materiali elettrolitici ed elettrodici in celle a combustibile ad Idrogeno. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- 27. Novembre 2006 Center for Solar Energy and Hydrogen Research, ZSW, Baden-Württemberg, Ulm, Germania.Post-doc visitatrice per la preparazione di materiali elettrolitici ed elettrodici e loro applicazione in celle a combustibile a membrana polimerica alimentate ad Idrogeno. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- **28.** Marzo 2008 Hunter College of City University of New York (CUNY), New York City, USA. Post-doc visitatrice per lo studio dei processi di Diffusione e Rilassamento tramite PGSE 1H-NMR. (titolo trasmesso) VALUTABILE

29. Maggio 2010 Hunter College of City University of New York (CUNY), New York City, USA. Ricercatrice visitatrice per misure strutturali e di trasporto tramite NMR su liquidi ionici ed elettroliti polimerici (titolo trasmesso) VALUTABILE

ATTIVITA' DIDATTICA

- **30.** A.A 2006/2007: Università Telematica Guglielmo Marconi Professore a Contratto per l'insegnamento di "Fondamenti di Chimica (Organica ed Inorganica)", facoltà di Scienze e Tecnologie Applicate, Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Agrarie. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **31.** A.A. 2012/2013 Università degli Studi di Roma La Sapienza: Titolare del corso di insegnamento "Ambiente e Beni Culturali" (CHIM/12, 6 CFU), Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. (titolo dicharato) VALUTABILE
- 32. A.A. 2014/2015 Università degli Studi di Roma La Sapienza: Titolare del corso di insegnamento "Chimica dei Beni Culturali e Metodi Elettrochimici" (9 CFU totali 6 CFU in CHIM/02 e 3 CFU in CHIM/12 responsabile del modulo da 6 CFU in CHIM/02), Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **33.** A.A. 2015/2016 Università degli Studi di Roma La Sapienza Titolare del corso di insegnamento "Chimica dei Beni Culturali e Metodi Elettrochimici" (9 CFU, CHIM/02), Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **34.** A.A. 2016/2017 2017/2018 Università degli Studi di Roma La Sapienza: Titolare del corso di insegnamento "Chimica dei Beni Culturali e Metodi Elettrochimici" (6 CFU, CHIM/02), Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **35.** A.A. 2017/2018 Università degli Studi di Roma La Sapienza: Titolare del corso di insegnamento in lingua inglese "Air quality analysis" (6 CFU totali 3 CFU in CHIM/02 e 3 CFU in CHIM/12 responsabile del modulo da 3 CFU in CHIM/02), Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **36.** A.A. 2017/2018 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Supervisione di una tesi di dottorato in Scienze Chimiche, XXXIII ciclo. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **37.** A.A. 2016/2017 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Supervisione di una tesi di dottorato in Mathematical. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **38.** Supervisione di una tesi di dottorato in Models for Engineering, Electromagnetics and Nanosciences, curriculum Materials Science. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **39.** A.A. 2010/2011 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Supervisione, in qualità di Relatore, di tesi di laurea triennale (n. 3) e magistrale (n. 8) in Chimica e Chimica Industriale. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **40.** A.A. 2016/2017 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Supervisione, in qualità di Relatore, di n.3 tesi di laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **41.** A.A. 2010/2011 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Attività di Correlatore per tesi di laurea magistrale (n.4) in Chimica Industriale. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **42.** 2011-oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza, Dipartimento di Chimica Responsabile Scientifico di n.6 Assegnisti di Ricerca pagati su fondi di titolarità. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **43.** 2016-2017 Università degli Studi di Roma La Sapienza, Dipartimento di Chimica. Tutor per un progetto di Tirocinio Formativo post-laurea, retribuito su fondi di responsabilità propria. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **44.** 2017-2018 Università degli Studi di Roma La Sapienza, centro di ricerca Hydro-Eco. Responsabile Scientifico di n.1 Borsa di Studio, pagata su fondi di titolarità. (titolo dicharato)
- **45.** A.A. 2010/2011 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Membro di Commissioni di Esami di profitto per gli Insegnamenti "Sistemi di produzione e accumulo dell'energia" (LM in Chimica Industriale), "Advanced chemical methods in archaelogical materials science" (Erasmus Mundus Master in Archaeological Materials Science). (titolo dicharato) VALUTABILE

- **46.** A.A. 2011/2012 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Membro di commissioni di Laurea triennale e magistrale in Chimica e Chimica Industriale. (titolo dicharato). VALUTABILE
- **47.** A.A. 2014/2015 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Membro di commissioni di Laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **48.** A.A. 2015/2016 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza Membro di commissioni di Laurea magistrale in ARCHMAT Erasmus Mundus Master in Archaeological Materials Science. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **49.** A.A. 2010/2011 oggi Università degli Studi di Roma La Sapienza, Dipartimento di Chimica Membro di commissioni esaminatrici per l'attribuzione di Assegni di Ricerca, Borse di Studio e Tirocinio. SSD CHIM/02. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **50.** 2012÷2017 Università degli Studi di Camerino Attività di Revisore Esterno di n. 4 Tesi di Dottorato, Corso Chemical and Pharmaceutical Sciences and Biotechnologies, Curriculum Scienze Chimiche, School of Advanced Studies. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **51.** 2017 Università di Chieti e Pescara Attività di Revisore Esterno di n. 1 Tesi di Dottorato, Corso Biomolecular and Pharmaceutical Sciences. (titolo dicharato) VALUTABILE
- **52.** 2017 Università di Roma Tor Vergata Attività di Revisore Esterno di n. 1 Tesi di Dottorato, Corso Materials for Health, Environment and Energy. (titolo dicharato) VALUTABILE

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

- **53.** 2002-today Iscritta all'Ordine Interregionale dei Chimici di Lazio, Umbria, Abruzzo e Molise e al Consiglio Nazionale dei Chimici. (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **54.** 2002-today Socio della SCI (Società Chimica Italiana). Posizione attuale: I Divisione "Elettrochimica"; II Divisione "Chimica Fisica"; Gruppo Interdivisionale "Enerchem". (titolo dichiarato) VALUTABILE
- 55. 2003-today Socio ECS (Electrochemical Society). (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **56.** 2006-today Socio ISE (International Society of Elctrochemistry). (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **57.** 2009-today Afferente al Centro di Ricerca dell'Università di Roma La Sapienza, HYDRO-ECO "Hydrogren as an alternative and ecological energy carrier". (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **58.** 2016-today Invitata Permanente, in rappresentanza della Divisione di Elettrochimica, nel Consiglio Direttivo del Gruppo EnerCHEM (Gruppo Interdivisionale di Chimica per le Energie Rinnovabili) della Società Chimica Italiana. Triennio 2016-2018. (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **59.** 2007 Vincitrice del Premio Eni Italgas "Debutto nella Ricerca", XIX edizione, per gli studi condotti su nuove tecnologie applicate alle celle a combustibile. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- **60.** 2007 Vincitrice del Premio di Dottorato "Fondazione Oronzio e Niccolò De Nora", assegnato dalla Divisione di Elettrochimica della Società Chimica Italiana. (titolo trasmesso) VALUTABILE
- **61.** 2010 Vincitrice del Premio "Serena Maurizi" assegnato alle migliori comunicazioni orali del IV Convegno Giovani del Dipartimento di Chimica di Sapienza Università di Roma. (titolo dicharato) VALUTABILE

ATTIVITA' DI PEER REVIEW

- 62. La candidata dichiara di svolgere attività di referee per le seguenti riviste internazionali: Journal of Power Sources, Elsevier Journal of Membrane Science, Elsevier Journal of Physics D: Applied Physics, Institute of Physics-IOP Electronic Journals Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, Elsevier Fuel Cells, Wiley-VCH ACS Applied Materials & Interfaces, American Chemical Society International Journal of Hydrogen Energy, Elsevier Solid State Ionics, Elsevier Electrochimica Acta, Elsevier Polymer, Elsevier Journal of Chemistry, Hindawi CHEMSUSCHEM, Wiley-VCH Chemistry of Materials, American Chemical Society Ionics, Springer ACS Nano, American Chemical Society. VALUTABILE
- **63.** 2016-2017 Esperto Valutatore Scientifico, selezionata da *Research Executive Agency* (REA) della Commissione Europea, nell'ambito di HORIZON 2020 "FET-OPEN-NOVEL IDEAS FOR RADICALLY NEW TECHNOLOGIES", Bandi: H2020-FETOPEN-1- 2016-2017-RIA_11-05-2016. H2020-FETOPEN-1- 2016-2017-RIA 17-01-2017. VALUTABILE

64. 2018 Guest Editor del Virtual Special Issue ILED "Ionic Liquids for Electrochemical Devices: from fundamentals to functional applications", di ELECTROCHIMCIA ACTA, per la pubblicazione di contributi selezionati dal convegno ILED-6 2018, di cui la candidata è organizzatrice. Periodo di accettazione dei contributi, da sottoporre a revisione tra pari: 12 settembre – 31 dicembre 2018. VALUTABILE

FINANZIAMENTI

- **65.** La candidata dichiara di aver partecipato come componente a 4 finanziamenti da bandi europei. VALUTABILE
- **66.** La candidata dichiara di aver partecipato come componente e/o assegnista, borsista, co.co.co. a 7 finanziamenti nazionali. VALUTABILE
- **67.** La candidata dichiara di aver partecipato a 7 finanziamenti da bandi di Ateneo, di cui 5 come PI e 2 come componente. VALUTABILE
- **68.** La candidata dichiara di aver partecipato a 6 finanziamenti da industrie, di cui 4 come PI e 2 come componente. VALUTABILE

BREVETTI

- **69.** 2008-today Socio fondatore di "Eco Recycling" Srl, primo SPIN OFF di trasferimento tecnologico, nel settore dello smaltimento dei rifiuti speciali, dell'Università di Roma La Sapienza. (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **70.** 2017 Brevetto Europeo "Method of making an electrochromic device" del 7.11.2017. Application No./Patent No. 17200453.3 1210. Applicant/Proprietor: Solvay Specialty Polymers Italy SpA. Ruolo della candidata: Inventore. (titolo trasmesso) VALUTABILE

RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- **71.** La candidata dichiara la partecipazione a congressi nazionali ed internazionale di cui risulta avere n.13 invited speakes, n.30 comunicazioni orali e n.15 poster. VALUTABILE
- **72.** La candidata dichiara di essere stata membro del comitato scientifico di 7 Congressi nazionali e internazionali, membro del comitato organizzativo di 4 Congressi nazionali e internazionali, responsabile organizzativo di 2 Congressi, membro del comitato organizzativo di una scuola nazionale. VALUTABILE

Valutazione sui titoli

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

La candidata ha conseguito il diploma di laurea in Chimica nel 2002 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (110/110 e lode), ed il Dottorato di Ricerca in Scienza dei materiali nel 2006 presso la medesima università con una tesi dal titolo "Study of electrolytic and electrodic materials for low temperature fuel cell applications".

La candidata ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per i Settori Concorsuali 03/B1 (nel 2018), 03/A2 (nel 2014 e nel 2018), 03/B2 (nel 2018). Ha inoltre conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di I Fascia per i Settori Concorsuali 03/B1 (nel 2018), e 03/A2 (nel 2018).

La candidata ha svolto attività didattica in ambito universitario come titolare di corsi pertinenti i SSD CHIM/12 e CHIM/02 e quindi non pertinenti al SSD CHIM/03.

La candidata dichiara di aver trascorso diversi periodi di studio e ricerca all'estero sia come dottoranda che come "Post-Doc" e "Visiting Researcher", di essere stata titolare di un Co.Co.Co., di un contratto di collaborazione a progetto, di due borse di studio, e di due assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza". Nel periodo 2010-2012 è stata ricercatore a Tempo Determinato (art. 1, comma 14, della Legge 4 novembre 2005, n. 230), SSD CHIM/02. Dal febbraio 2014 è ricercatore RTD-A, nel Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza". La candidata dichiara di essere stata PI in 5 finanziamenti da bandi di ateneo e in 4 finanziamenti da industrie. Presenta un brevetto italiano ed un brevetto europeo. Dichiara di aver partecipato come "Invited Speaker" a 13 congressi nazionali ed internazionali e a 30 come oratore. La candidata dichiara anche di aver

fatto parte del comitato scientifico o del comitato organizzativo di diversi congressi nazionali ed internazionali.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è molto buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

La candidata ha conseguito la laurea in Chimica nel 2002 con la votazione di 110/110 e Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", l'abilitazione alla professione di Chimico nello stesso anno, e successivamente il Dottorato di ricerca in Scienze dei Materiali (titolo della tesi di dottorato: "Study of electrolytic and electrodic materials for low temperature fuel cell applications") nel 2006. Ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1 nel 2018. Nello stesso anno ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/A2. Precedentemente aveva conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per i Settori Concorsuali 03/A2 e 03/B2. Ha trascorso diversi periodi di ricerca all'estero sia come dottoranda sia come post-doc. Ha usufruito di diversi contratti, borse di studio e assegni di ricerca presso l'Università di Roma "La Sapienza". Dal 2014 è RTDa, Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02 - Chimica Fisica, ruolo già ricoperto nel periodo Gennaio 2010-Dicembre 2012 per lo setto SSD. Ha tenuto diversi corsi di insegnamento nei settori CHIM/02 e CHIM/12. Relatore di 1 tesi di dottorato in Scienze Chimiche e di 1 tesi di dottorato in Mathematical, di tesi di laurea triennale (n. 3) e magistrale (n. 8) in Chimica e Chimica Industriale, e di n.3 tesi di laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. Inoltre ha svolto attività di Revisore Esterno di 6 tesi di Dottorato. Nel 2007 è risultata vincitrice del Premio Eni Italgas "Debutto nella Ricerca", XIX edizione, per gli studi condotti su nuove tecnologie applicate alle celle a combustibile e del Premio di Dottorato "Fondazione Oronzio e Niccolò De Nora". Ha partecipato a 7 finanziamenti da bandi di Ateneo, di cui 5 come PI, come componente a 4 finanziamenti da bandi europei e come PI a 4 finanziamenti da industrie. E' socio fondatore di uno SPIN OFF di trasferimento tecnologico, nel settore dello smaltimento dei rifiuti speciali, dell'Università di Roma La Sapienza e ha presentato domanda per un brevetto europeo. Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche e ha partecipato a numerosi congressi e convegni nazionali e internazionali, anche come componente del comitato scientifico o del comitato organizzatore, e ha presentato 13 comunicazioni orali su invito.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è molto buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

La candidata ha conseguito il diploma di laurea in Chimica nel 2002 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con voto di 110/110 e lode, ed il Dottorato di Ricerca in Scienza dei materiali nel 2006 presso la medesima università con una tesi dal titolo "Study of electrolytic and electrodic materials for low temperature fuel cell applications". Nel 2002 ha conseguito l'abilitazione alla professione di Chimico.

Nel 2018 la candidata ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1. Ha inoltre conseguito nel 2018 l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di I Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1, nel 2014 e nel 2018 di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/A2, nel 2014 di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/B2, nel 2018 di Professore di I e II Fascia per il Settore Concorsuale 03/A2.

La candidata ha svolto attività didattica in ambito universitario come titolare di corsi nei SSD CHIM/12 e CHIM/02 per la Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali, e guindi non pertinente al SSD CHIM/03 del bando.

Dichiara di aver trascorso periodi nel 2003 come dottoranda visitatrice presso il CNR – ITAE, Messina, e la Chalmers University of Technology, Göteborg, Svezia e nel 2005 presso l'Hunter College of City University of New York (CUNY). Come Post Doc ha trascorso periodi nel 2006 presso il Center for Solar Energy and Hydrogen Research, ZSW, Baden-Württemberg, Ulm, Germania e l'Hunter College of City University of New York espresso lo stesso centro di New York nel 2010 come ricercatrice visittatrice. Dichiara di essere stata titolare di un Co.Co.Co. (2002-2003) con il Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza", di un contratto di collaborazione

a progetto (2005-2006), di due borse di studio (2006 e 2009), di due assegno1di ricerca (2007-2008 e 2013-2014) presso lo stesso Dipartimento. Nel periodo 2010-2012 è stata ricercatore a Tempo Determinato (art. 1, comma 14, della Legge 4 novembre 2005, n. 230), SSD CHIM/02. Dal febbraio 2014 è ricercatore RTD-A, nel Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02. La candidata dichiara di essere stata P.I in n. 5 finanziamenti da bandi di ateneo e in n. 4 finanziamenti da industrie. Presenta un brevetto italiano ed un brevetto europeo. La candidata è membro della SCI, Divisione di Elettrochimica e Divisione di Chimica Fisica. Presenta tre premi nazionali e dichiara di aver partecipato come invited peaker a n.13 congressi nazionale ed internazionali e a n. 30 come oratore. La candidata dichiara infine di aver fatto parte del comitato scientifico o del comitato organizzativo di diversi congressi nazionali ed internazionali.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è molto buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Sono stati considerati i dati bibliometrici forniti dalla candidata e presi dalla banca dati SCOPUS

- A. D'Epifanio, M.A. Navarra, F. Weise, B. Mecheri, J. Farrington, S. Licoccia, S. Greenbaum, Chem. of Materials, 22 (2010) 813-821, doi: 10.1021/cm901486t: "Composite Nafion/sulfated zirconia membranes: effect of the filler surface properties on proton transport characteristics". (IF 6.400, numero citazioni = 69, Q1).
- **2.** J. Hassoun, A. Fernicola, **M.A. Navarra**, S. Panero, B. Scrosati, *J. Power Sources*, 195 (2010) 574-579, doi: 10.1016/j.jpowsour.2009.07.046: "*An advanced lithium-ion battery based on a nanostructured Sn-C anode and an electrochemically stable LiTFSI-Py24TFSI ionic liquid electrolyte*". (IF 4.290, numero citazioni = 68, Q1).
- **3. M.A. Navarra**, J. Manzi, L. Lombardo, S.Panero and B. Scrosati, *ChemSusChem*, 4 (2011) 125, doi: 10.1002/cssc.201000254: "*Ionic liquid based membranes as electrolytes for advanced lithium polymer batteries*". (IF 6.827, numero citazioni = 50, Q1).
- **4.** G.A. Giffin, M. Piga, S. Lavina, **M.A. Navarra**, A. D'Epifanio, B. Scrosati, V. Di Noto, *J. Power Sources*, 198 (2012) 66-75, doi: 10.1016/j.jpowsour.2011.09.093: "Characterization of sulfated-zirconia/Nafion® composite membranes for proton exchange membrane fuel cells". (IF 4.675, numero citazioni = 38, Q1).
- **5.** L. Lombardo, S. Brutti, **M.A. Navarra**, S. Panero, P. Reale, *J. Power Sources*, 227 (2013) 8-14, doi: 10.1016/j.jpowsour.2012.11.017: "*Mixtures of ionic liquid Alkylcarbonates as electrolytes for safe lithium-ion batteries*". (IF 5.211, numero citazioni = 96, Q1).
- **6.** Morten Wetjen, **Maria Assunta Navarra**, Stefania Panero, Stefano Passerini, Bruno Scrosati and Jusef Hassoun, *ChemSusChem*, 6 (2013) 1037, DOI: 10.1002/cssc.201300105: "Composite Poly(ethylene oxide) Electrolytes Plasticized by N-Alkyl-N-butylpyrrolidinium Bis(trifluoromethanesulfonyl)imide for Lithium Batteries". (IF 7.117, numero citazioni = 35, Q1).
- **7. M. A. Navarra***, *MRS Bulletin*, July 2013, volume 38, pp 548-553, DOI 10.1557/mrs.2013.152: "Ionic liquids as safe electrolyte components for Li-metal and Li-ion batteries". (IF 5.069, numero citazioni= 48, Q1).
- **8.** M. Sgambetterra, S. Panero, J. Hassoun, **M. A. Navarra***, *Ionics*, (2013), volume 19, pp 1203-1206, DOI 11581-013-0960-8: "Hybrid membranes based on sulfated titania nanoparticles as low cost proton conductors". (IF 1.836, numero citazioni = 7, Q1).
- 9. Jagath Pitawala, Maria Assunta Navarra, Bruno Scrosati, Per Jacobsson, Aleksandar Matic, J. Power Sources, 245 (2014) 830-835, doi: 10.1016/j.jpowsour.2013.07.045: "Structure and properties of Li-ion conducting polymer gel electrolytes based on ionic liquids of the pyrrolidinium cation and the bis(trifluoromethanesulfonyl)imide anion". (IF 6.217, numero citazioni = 22, Q1).
- **10.** R. Scipioni, D. Gazzoli, F. Teocoli, O. Palumbo, A. Paolone, N. Ibris, S. Brutti, **M. A. Navarra***, *Membranes* (2014), volume 4, pp 123-142; doi: 10.3390/membranes4010123: "Preparation and characterization of nanocomposite polymer membranes containing functionalized SnO2 additives". (IF: non ancora disponibile Citazioni (Scopus) = 23, Q1).
- **11.** I. Nicotera, V. Kosma, C. Simari, G.A. Ranieri, M. Sgambetterra, S. Panero, **M.A. Navarra**, *International Journal of Hydrogen Energy*, 40 (2015) 14651-14660, DOI:

- 10.1016/j.ijhydene.2015.06.137: "An NMR study on the molecular dynamic and exchange effects in composite Nafion/sulfated titania membranes for PEMFCs". (IF 3.205, numero citazioni = 10, Q1).
- **12.** M. Branchi, M. Sgambetterra, I. Pettiti, S. Panero, **M.A. Navarra***, *International Journal of Hydrogen Energy*, 40 (2015) 14757-14767, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2015.07.030: "Functionalized Al2O3 particles as additives in proton-conducting polymer electrolyte membranes for fuel cell applications". (IF 3.205, numero citazioni = 9, Q1).
- **13. Maria Assunta Navarra***, Chiara Dal Bosco, Judith Serra Moreno, Francesco Maria Vitucci, Annalisa Paolone, Stefania Panero, *Membranes*, 5 (2015) 810-823, doi: 10.3390/membranes5040810: "Synthesis and Characterization of Cellulose-Based Hydrogels to be used as Gel Electrolytes". (IF: non ancora disponibile Citazioni (Scopus) = 9 Q1).
- **14. M.A. Navarra***, K. Fujimura, M. Sgambetterra, S. Panero, A. Tsurumaki, N. Nakamura, H. Ohno, B. Scrosati, *ChemSusChem*, 2017, 10, 2496-2504 doi: 10.1002/cssc.201700346: "New ether-functionalized morpholinium- and piperidinium-based ionic liquid as electrolyte components in lithium and lithium-ion batteries". (IF 7.411, numero citazioni = 3, Q1).
- **15.** Marco Renzi, Marco Agostini, **Maria Assunta Navarra**, Francesco Nobili, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42, 16686-16694, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.05.168: "An innovative membrane-electrode assembly for efficient and durable polymer electrolyte membrane fuel cell operations". (IF 4.229, numero citazioni = 6, Q1).
- **16.** Siracusano S., Baglio V., Nicotera I., Mazzapioda L., Aricò A.S., Panero S., **Navarra M.A.***, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42, 27851-27858, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.05.136: "Sulfated titania as additive in Nafion membranes for water electrolysis applications". (IF 4.229, numero citazioni = 0, Q1).
 - (*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

A. originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

B. congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 - Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena, parziale scarsa);

C. rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

D. apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso); **giudizio complessivo (A+B+C+D)** (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = \mathbf{OTTIMO} .

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C =ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = \mathbf{OTTIMO} .

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata ha pubblicato i primi articoli scientifici nel 2003. Dichiara di aver pubblicato n. 60 lavori, con una media di circa 4.0 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor di 196.667 corrispondente ad un valore medio per pubblicazione di 3.6, calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di aver ottenuto un totale di 1160 citazioni (numero medio di citazioni per pubblicazione 20) che le consentono di avere un H-index di 20.

Dal dicembre 2010 al maggio 2011 la candidata ha usufruito di un periodo di 5 mesi di astensione dal lavoro per congedo per maternità, e successivamente di un breve periodo (circa 1.5 mesi) di astensione dal lavoro per congedo parentale. Il numero dei lavori per anno effettivo viene quindi corretto al valore di circa 4.1.

Valutazione sulla produzione complessiva

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività scientifica della candidata è sostanzialmente indirizzata allo sviluppo di materiali e componenti elettrodiche ed elettrochimiche per dispositivi finalizzati alla conversione e all'accumulo di energia come batterie al litio e celle a combustibile alimentate a idrogeno. I metodi di indagine utilizzati per la caratterizzazione dei materiali sintetizzati spaziano dall'uso di tecniche elettrochimiche a tecniche chimico-fisiche di analisi spettroscopica e morfologica-strutturale. Sebbene la produzione scientifica della candidata sia solo parzialmente congruente con il SSD CHIM/03 la sua consistenza è complessivamente più che buona considerando il suo sviluppo temporale continuativo, l'originalità e il rigore metodologico. Le pubblicazioni presentate ai fini della valutazione sono di livello molto buono su riviste ad ampia diffusione internazionale e con un numero medio significativo di citazioni per pubblicazione. L'apporto individuale del candidato è chiaramente enucleabile e significativo risultando autore di riferimento o primo autore in più della metà delle 16 pubblicazioni presentate.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva della candidata è buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

L'attività scientifica della candidata riguarda principalmente la sintesi e caratterizzazione di nanomateriali e materiali inorganici per applicazioni in batterie al litio e in celle a combustibile alimentate ad idrogeno utilizzando tecniche d'indagine elettrochimiche (spettroscopia d'impedenza, ciclazioni galvanostatiche, metodi potenziometrici/amperometrici) e chimico-fisica (e.g. analisi termiche, strutturali e morfologiche, spettroscopia Raman/IR, NMR).

Le 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione, tutte in collaborazione sia nazionale sia internazionale, attestano un apporto individuale significativo, dal momento che la candidata è primo autore o autore di riferimento in n. 8 pubblicazioni. Le 16 pubblicazioni sono su riviste internazionali ad ampia diffusione nella comunità scientifica. La collocazione editoriale del primo quartile (Q1) di quasi tutte le 16 pubblicazioni presentate e l'elevato numero di citazioni indicano buona originalità, valenza scientifica e rigore metodologico. La consistenza scientifica della produzione complessiva della candidata è buona, sviluppata con continuità temporale, ma non del tutto congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva della candidata è buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

L'attività scientifica della candidata riguarda principalmente la sintesi e caratterizzazione di materiali per dispositivi elettrochimici avanzati volti alla conversione e all'accumulo di energia, allo sviluppo di nuove componenti elettrodiche ed elettrolitiche (e.g. liquidi ionici, membrane polimeriche a conduzione ionica) sia per batterie al litio che per celle a combustibile alimentate ad idrogeno e all'utilizzo di tecniche d'indagine elettrochimica (spettroscopia d'impedenza, ciclazioni galvanostatiche, metodi potenziometrici/amperometrici) e chimico-fisica (e.g. analisi termiche, strutturali e morfologiche, spettroscopia Raman/IR, NMR). La produzione scientifica della candidata è solo parzialmente congruente con il SSD CHIM/03 del bando. La consistenza scientifica della produzione complessiva è buona, sviluppata con continuità temporale. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di quasi tutte le 16 pubblicazioni presentate e nell'elevato numero di citazioni ottenute. L'apporto individuale della candidata alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta significativo, risultando la candidata primo autore o autore di riferimento in n. 8 pubblicazioni.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

La candidata ha conseguito il diploma di laurea in Chimica nel 2002 con la votazione di 110/110 e Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", l'abilitazione alla professione di Chimico nello stesso anno, e successivamente il Dottorato di ricerca in Scienze dei Materiali con una tesi dal titolo: "Study of electrolytic and electrodic materials for low temperature fuel cell applications") nel 2006.

La candidata ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per i Settori Concorsuali 03/B1 (nel 2018), 03/A2 (nel 2014 e nel 2018), 03/B2 (nel 2018). Ha inoltre conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di I Fascia per i Settori Concorsuali 03/B1 (nel 2018), e 03/A2 (nel 2018).

La candidata dichiara di aver trascorso diversi periodi di studio e ricerca all'estero sia come dottoranda che come "Post-Doc" e "Visiting Researcher", di essere stata titolare di un Co.Co.Co., di un contratto di collaborazione a progetto, di due borse di studio, e di due assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza". Nel periodo 2010-2012 è stata ricercatore a Tempo Determinato (art. 1, comma 14, della Legge 4 novembre 2005, n. 230), SSD CHIM/02. Dal febbraio 2014 è ricercatore RTD-A, nel Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza".

La candidata ha svolto attività didattica in ambito universitario come titolare di corsi pertinenti i SSD CHIM/12 e CHIM/02 e quindi non pertinenti al SSD CHIM/03. E' stata relatore di 1 tesi di dottorato in Scienze Chimiche e di 1 tesi di dottorato in Mathematical, di tesi di laurea triennale (n. 3) e magistrale (n. 8) in Chimica e Chimica Industriale, e di n.3 tesi di laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali. Inoltre ha svolto attività di Revisore Esterno di 6 tesi di Dottorato. Nel 2007 è risultata vincitrice del Premio Eni Italgas "Debutto nella Ricerca", XIX edizione, per gli studi condotti su nuove tecnologie applicate alle celle a combustibile e del Premio di Dottorato "Fondazione Oronzio e Niccolò De Nora". Ha partecipato a 7 finanziamenti da bandi di Ateneo, di cui 5 come PI, come componente a 4 finanziamenti da bandi europei e come PI a 4 finanziamenti da industrie. E' socio fondatore di uno SPIN OFF di trasferimento tecnologico, nel settore dello smaltimento dei rifiuti speciali, dell'Università di Roma "La Sapienza". Presenta un brevetto italiano ed un brevetto europeo. Svolge attività di Referee per diverse riviste scientifiche e ha partecipato a numerosi congressi e convegni nazionali e internazionali, anche come componente del comitato scientifico o del comitato organizzatore e dichiara di aver partecipato come "Invited Speaker" a 13 congressi nazionali ed internazionali e a 30 come oratore La candidata è membro della SCI, Divisione di Elettrochimica e Divisione di Chimica Fisica.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è molto buono.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO-**

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = parziale; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = parziale; C =ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività scientifica della candidata è sostanzialmente indirizzata allo sviluppo di materiali e componenti elettrodiche ed elettrochimiche per dispositivi finalizzati alla conversione e all'accumulo di energia come batterie al litio e celle a combustibile alimentate a idrogeno. I metodi di indagine utilizzati per la caratterizzazione dei materiali sintetizzati spaziano dall'uso di tecniche elettrochimiche a tecniche chimico-fisiche di analisi spettroscopica e morfologica-strutturale.

Le 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione, tutte in collaborazione sia nazionale sia internazionale, attestano un apporto individuale chiaramente enucleabile e significativo, dal momento che la candidata è primo autore o autore di riferimento in n. 8 pubblicazioni. Le 16 pubblicazioni sono su riviste internazionali ad ampia diffusione nella comunità scientifica. La collocazione editoriale del primo quartile (Q1) di quasi tutte le 16 pubblicazioni presentate e l'elevato numero di citazioni indicano buona originalità, valenza scientifica e rigore metodologico. Sebbene la produzione scientifica della candidata sia solo parzialmente congruente con il SSD CHIM/03, la sua consistenza è complessivamente più che buona, sviluppata con continuità temporale.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva della candidata è buono.

CANDIDATO: RIGAMONTI Luca

TITOLI PRESENTATI

- 1. Titolo di studio: Laurea magistrale in Chimica vecchio ordinamento, equiparata ai sensi del DM 09 luglio 2009 alla laurea specialistica classe 62/S DM 509/99 e alla laurea magistrale classe LM-54 DM 270/04, conseguita il 28 ottobre 2004 presso l'Università degli Studi di Milano (UniMI) con votazione di 110/110 e lode.
- 2. Dottorato in Scienze Chimiche, conseguito il 14 dicembre 2007 presso UniMI.
- 3. Titolo della Tesi: Chemical and Magnetic Studies on Tridentate Schiff Base Cu(II) Complexes and Nonlinear Optical Studies on Salen-Type Cu(II) Complexes and Ru(II) Alkynyl Organometallics (titolo dichiarato).
- **4.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di II Fascia nel settore concorsuale 03/B1, ai sensi dell'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240, conseguita in data 07/08/2018.
- **5.** Abilitazione all'esercizio della professione di chimico (esame di stato, sessione 2007) conseguito il 11/06/2007. (titolo dichiarato)

ESPERIENZE PROFESSIONALI

- **6.** Da febbraio 2006 a febbraio 2007 parte del dottorato Australian National University (ANU), Research School of Chemistry, Canberra, Australia Supervisore del progetto: Prof. Mark G. Humphrey. (titolo dichiarato).
- 7. 2008-2009 periodi di soggiorno per ricerca in collaborazione con il Prof. Jan Reedijk sulla caratterizzazione magnetica di complessi polinucleari di rame(II) Universiteit Leiden, Leiden Institute of Chemistry, Leiden, The Netherlands Presso i laboratori del Prof. Jan Reedijk (reedijk@chem.leidenuniv.nl). (titolo dichiarato)
- **8.** Da novembre 2009 a gennaio 2010 'visiting fellow' durante il Post-Doc come vincitore dell'ACT-ARIA Award per promuovere la ricerca scientifica in collaborazione tra Italia e Australia col progetto dal titolo: Hybrid coordination-organometallic systems for nonlinear optics Australian National University (ANU), Research School of Chemistry, Canberra, Australia Supervisore: Prof. Mark G. Humphrey. (titolo dichiarato)
- 9. 01 novembre 2007 31 ottobre 2011: assegno di ricerca presso UniMI, Dipartimento di Chimica, conferito ai sensi dell'art. 51, comma 6, della Legge n. 449/1997 e s.m.i. (titolo dichiarato)
- 10. 01 novembre 2011 31 ottobre 2012: assegno di ricerca presso l'Università degli Studi di Firenze (UniFI), Dipartimento di Chimica 'Ugo Schiff', conferito ai sensi dell'art. 22, della Legge n. 240/2010. (titolo dichiarato)
- **11.** 01 dicembre 2015 30 novembre 2016: assegno di ricerca presso UniMORE, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, conferito ai sensi dell'art. 22, della Legge n. 240/2010. (titolo dichiarato)
- **12.** 01 aprile 2017 31 marzo 2018: assegno di ricerca presso UniMORE, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, conferito ai sensi dell'art. 22, della Legge n. 240/2010. (titolo dichiarato)
- **13.** 16 aprile 2018 15 gennaio 2019: borsa di ricerca presso UniMORE, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, conferita ai sensi della Legge 4 aprile 2012, n. 35. (titolo dichiarato)
- 14. 01 dicembre 2012 30 novembre 2015: Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art. 24, comma 3, lett. a), Legge 30.12.2010, n. 240 (RTD tipo A), presso UniMORE, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, nell'ambito del progetto di ricerca "Progettazione, sintesi e caratterizzazione chimica di nanomagneti molecolari per la spintronica" all'interno del progetto FIRB "Nanomagneti molecolari su superfici metalliche e magnetiche per applicazioni nella spintronica molecolare". Supervisore nazionale: Prof. Roberta Sessoli, UniFI, Supervisore locale: Prof. Andrea Cornia, UniMORE. (titolo dichiarato)

ATTIVITA' DIDATTICA

- **15.** ottobre dicembre 2005: esercitatore per il corso di Chimica Generale per i corsi di laurea della Facoltà di Agraria (UniMI), docente: Prof. Luigi Garlaschelli. (titolo dichiarato)
- **16.** gennaio 2005 ottobre 2007: rappresentante dei dottorandi di Scienze Chimiche e Chimica Industriale presso il Dipartimento di Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica 'L. Malatesta' (UniMI). (titolo dichiarato)
- **17.** ottobre 2007: assistente di laboratorio per il corso di Chimica Analitica Strumentale, Corso di laurea in Biotecnologie (UniMI), docente: Dr. Maria Grassi. (titolo dichiarato)
- **18.** novembre dicembre 2007: esercitatore per il corso di Chimica Generale per i corsi di Laurea della Facoltà di Agraria (UniMI), docente: Prof. Luigi Garlaschelli. (titolo dichiarato)
- **19.** marzo maggio 2008: assistente di laboratorio per il corso di Chimica Generale, Corso di Laurea in Biologia (UniMI), docente: Prof. Donatella Strumolo. (titolo dichiarato)
- **20.** novembre dicembre 2008: esercitatore per il corso di Chimica Generale per i corsi di Laurea della Facoltà di Agraria (UniMI), docente: prof. Luigi Garlaschelli. (titolo dichiarato)
- **21.** gennaio 2009: assistente di laboratorio per il corso di Chimica Analitica Strumentale, Corso di laurea in Biotecnologie (UniMI), docente: Dr. Laura Santagostini. (titolo dichiarato)
- **22.** maggio giugno 2009: assistente di laboratorio per il corso di Chimica Generale, Corso di Laurea in Biologia (UniMI), docente: Prof. Achille Fusi. (titolo dichiarato)
- **23.** gennaio marzo 2011: esercitatore per il corso di Chimica Generale per i corsi di Laurea della Facoltà di Agraria (UniMI), docente: prof. Luigi Garlaschelli. (titolo dichiarato)

- **24.** settembre 2007 luglio 2011: segretario e organizzatore di eventi per la Commissione Orientamento dell'Area Chimica dell'Università degli Studi di Milano (referente: prof. Sandra Rondinini, sandra.rondinini@unimi.it). (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **25.** marzo maggio 2011: assistente di laboratorio per il corso di Chimica Generale, Corso di Laurea in Biologia (UniMI), docente: Prof. Donatella Strumolo (titolo dichiarato)
- **26.** marzo maggio 2013: assistente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica Superiore, Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE), docente: Prof. Andrea Cornia. (titolo dichiarato)
- **27.** aprile giugno 2013: assistente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica I, Corso di Laurea Triennale in Chimica (UniMORE), docente: Prof. Ledi Menabue
- 28. marzo maggio 2014: assistente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica I, Corso di Laurea Triennale in Chimica (UniMORE), docente: Prof. Ledi Menabue. (titolo dichiarato)
- 29. marzo giugno 2014: docente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica Superiore, Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE), all'interno del contratto RTD tipo A. (titolo dichiarato)
- **30.** marzo maggio 2015: assistente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica I, Corso di Laurea Triennale in Chimica (UNIMORE), docente: Prof. Ledi Menabue. (titolo dichiarato)
- 31. marzo giugno 2015: docente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica Superiore, Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE), all'interno del contratto RTD tipo A. (titolo dichiarato)
- **32.** marzo maggio 2016: assistente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica Superiore, Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE), docente: Prof. Andrea Cornia. (titolo dichiarato)
- **33.** aprile giugno 2016: assistente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica I, Corso di Laurea Triennale in Chimica (UniMORE), docente: Prof. Ledi Menabue. (titolo dichiarato)
- **34.** ottobre 2016 gennaio 2017: contratto di tutorato per il Corso di Chimica Generale e Inorganica con Laboratorio, Corso di Laurea Triennale in Chimica Industriale (UniBO), docenti di riferimento: Prof. Valerio Zanotti, Prof.ssa Maria Carmela Iapalucci, Prof. Stefano Zacchini. (titolo dichiarato)
- **35.** settembre 2017 ottobre 2017: tutor per il corso di Chimica Organica I, Corso di Laurea Triennale in Chimica (UniMORE), docente: Prof.ssa Emanuela Libertini in preparazione degli studenti all'esame finale. (titolo dichiarato)
- 36. ottobre 2017 gennaio 2018: contratto di tutorato per il Corso di Chimica Generale e Inorganica con Laboratorio, Corso di Laurea Triennale in Chimica Industriale (UniBO), docenti di riferimento: Prof. Valerio Zanotti, Prof.ssa Maria Carmela Iapalucci, Prof. Stefano Zacchini. (titolo dichiarato)
- **37.** ottobre 2017 dicembre 2017: tutor in supporto alla attività didattica per gli studenti del Corso di Laboratorio in Chimica Generale per il 1° anno, Corso di Laurea Triennale in Chimica (UniMORE), docenti di riferimento del corso: Prof. Gianantonio Battistuzzi, Prof. Gianluca Malavasi. (titolo dichiarato)
- **38.** aprile 2018 settembre 2018: contratto di docenza integrativa per il corso di Chimica Organica I, Corso di Laurea Triennale in Chimica (UniMORE), docente: Prof.ssa Emanuela Libertini. (titolo dichiarato)
- **39.** ottobre 2013: membro e segretario della Commissione per la selezione di un posto da postdoc nell'area CHIM/03 (Chimica Generale e Inorganica) presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche (UniMORE), titolo della ricerca: Fotomodulazione di nanomagneti molecolari. (titolo dichiarato)
- 40. marzo giugno 2015: assistente supervisore dello student in Erasmus Ms. Carri Cotton, University of Warwick, titolo del progetto: A 3D-MOF with single-molecule magnet as linkers: assembly strategy, structural characterization and magnetic behaviour (traduzione: Un 3D-MOF con magneti a singola molecola come linkers: assemblaggio, caratterizzazione strutturale e comportamento magnetico), supervisore: Prof. Andrea Cornia (UniMORE), referente Erasmus UniMORE: Prof. Franco Ghelfi, referente Erasmus Warwick: Dr. Manuela Tosin. (titolo dichiarato)

- 41. marzo 2016: promotore e sostenitore della firma del Memorandum of Understanding for the Development of Collaborative Research Activities for Culture and Science & Technology tra l'Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia (Italia) e la Curtin University of Technology (Perth, Australia), per lo scambio di studenti nel periodo di tesi sperimentale col programma Overseas UniMORE, validità: tre+tre anni (2016-2019 e 2019-2022). (titolo dichiarato)
- **42.** 2007 presente: correlatore di tesi dei seguenti studenti di laurea sia Triennale che Magistrale durante il loro periodo di lavoro sperimentale: 14 tesi triennali, 11 tesi magistrali. (titolo dichiarato)
- **43.** 2013 presente: controrelatore dei seguenti studenti laureandi durante il loro periodo di tesi: 3 tesi magistrali. (titolo dichiarato)
- **44.** luglio 2012 dicembre 2013: collaborazione con la Casa Editrice Edi-Ermes s.r.l. di Milano per il progetto 'Virtual Campus' finalizzato alla creazione di un supporto didattico per l'apprendimento online del libro 'Chimica Generale e Inorganica', curatore del libro: Prof. Maurizio Speranza, Edi. Ermes 2013 (referente casa editrice: Dott. Raffaele Grandi, r.grandi@eenet.it, www.eenet.it). (titolo dichiarato)
- **45.** marzo 2017 maggio 2017: Coach di laboratorio in preparazione al test universitario di medicina indirizzato agli alunni della scuola secondaria di secondo grado Istituto Sacro Cuore, Modena, Italia (referente: Dott. Raffaella Tessitore, tessitore@sacrocuoremodena.it). (titolo dichiarato)

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

- **46.** Società Chimica Italiana SCI (n° tessera: 15472)
- **47.** American Chemical Society ACS (n° tessera: 30055363)
- 48. Royal Society of Chemistry, MRSC (n° tessera: 558523)
- **49.** Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, INSTM (n° tessera: 4570)
- **50.** Attestato/premio: ARIA CANBERRA AWARD FOR RESEARCH COLLABORATION 2009, vincitore di 3000 AUD (dollari australiani) per un periodo di ricerca in collaborazione scientifica e tecnologica tra Italia e Australia, col progetto dal titolo: Hybrid coordinationorganometallic systems for nonlinear optics. (titolo dichiarato)
- **51.** Vincitore dell'International Picture Contest 'Everything is Chemistry', concorso fotografico a sfondo scientifico organizzato dall'European Young Chemists Network (EuCheMS) in occasione dell'Anno Internazionale della Chimica 2011 (IYC 2011), premio ricevuto durante il 3rd EuCheMS Chemistry Congress, Norimberga, Germania, 29 agosto 2 settembre 2010. (titolo dichiarato)

ATTIVITA' DI PEER REVIEW

- 52. Il candidato dichiara di svolgere attività di referee per le seguenti riviste internazionali: Inorganic Chemistry, Dalton Transactions, Chemistry A European Journal, Coordination Chemistry Reviews, New Journal of Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry, Journal of Physical Chemistry, Polyhedron, Inorganica Chimica Acta, Journal of Molecular Structure, Materials, Inorganics, Crystals, Reviews in Inorganic Chemistry, RSC Advances, Chemistry Select, ChemPlusChem, International Journal of Physical Sciences, Chinese Journal of Chemistry, Applied Petrochemical Research, Current Organic Chemistry, Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials.
- **53.** Componente della Giuria per le Edizioni 2014, 2015, 2016, 2017 e 2018 del Premio Nazionale di Divulgazione Scientifica organizzato dall'Associazione Italiana del Libro, area A: Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali (www.associazioneitalianadellibro.it). (titolo dichiarato)
- **54.** da ottobre 2017: Membro dell'Editorial Advisory Group prima 'Polymer Science' e successivamente 'Chemistry' per la Cambridge Scholars Publishing (CSP) (www.cambridgescholars.com). (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **55.** da marzo 2018: Guest Editor per lo Special Issue 'Trends in Nonlinear Optical Materials' per la rivista Materials (ISSN: 1996-1944, http://www.mdpi.com/journal/materials). (titolo dichiarato)

FINANZIAMENTI

- **56.** Il candidato dichiara di aver partecipato ai seguenti progetti:
- Progetto dal titolo: Hybrid coordination-organometallic systems for nonlinear optics come vincitore dell'ACT-ARIA Award per promuovere la ricerca scientifica in collaborazione tra Italia e Australia, finanziato con 3000 AUD utilizzati durante il periodo di ricerca come 'visiting fellow' da novembre 2009 a gennaio presso la Australian National University (ANU), Research School of Chemistry, Canberra, Australia, sotto la supervisione del Prof. Mark G. Humphrey.
- Sincrotrone Elettra Proposal n. 20170188 approvato dal titolo: Powder X-ray diffraction structural studies on solvent-responsive spin crossover iron(II) compounds (traduzione: Studi strutturali via diffrazione di raggi X a polveri su composti di ferro(II) con proprietà spin crossover modulabili dal solvente), uso della beamline MCX (Material Characterization via X-ray diffraction) dall'8 al 10 dicembre 2017, proponente: Dr. Luca Rigamonti, partecipanti: Dr. Luca Rigamonti, Dr. Rita Mazzoni, rita.mazzoni@unibo.it, UniBO.

RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- **57.** Il candidato dichiara la partecipazione a congressi nazionali ed internazionale ed a scuole in cui 4 come invited speaker, 9 con contributo orale e 20 con poster.
- **58.** febbraio 2011: organizzatore della manifestazione a carattere divulgativo 'La Chimica in Mostra 2011' per l'Anno Internazionale della Chimica, durata di una settimana, con oltre mille visitatori (www.chimica.unimi.it).

Valutazione sui titoli

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Il candidato ha conseguito il diploma di laurea (V. O.) in Chimica nel 2004 presso l'Università degli studi di Milano (UniMI) (110/110 e lode) ed il dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2007 presso la stessa università con una tesi dal titolo "Chemical and Magnetic Studies on Tridentate Schiff Base Cu(II) Complexes and Nonlinear Optical Studies on Salen-Type Cu(II) Complexes and Ru(II) Alkynyl Organometallics".

Nel 2018 ha conseguito l'abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per il Settore Concorsuale 03/B1.

E' stato docente di laboratorio (2014 e 2015) per il Corso di Chimica Inorganica Superiore per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE). Ha svolto attività didattica anche come esercitatore per il corso di Chimica Generale per i corsi di laurea della Facoltà di Agraria (UniMI) e come assistente di laboratorio per il corso di Chimica Generale (Corso di Laurea in Biologia, UniMI), per il corso di Chimica Analitica Strumentale del corso di laurea in Biotecnologie (UniMI), per il corso di Chimica Inorganica Superiore del corso di laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE), per il corso di Chimica Inorganica I del corso di laurea Triennale in chimica (UniMORE). Tutta l'attività didattica universitaria dichiarata è congruente con l'SSD CHIM/03.

Dichiara di essere stato titolare di un assegno di ricerca "Post Doc" presso il Dipartimento di Chimica (UniMi), di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica (UniFI), di due assegni di ricerca e di una borsa di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche (UniMORE).

Dichiara inoltre di essere stato ricercatore RTD-A (2012-2015) presso UniMORE (Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche).

Il candidato dichiara di aver svolto tre periodi di soggiorno di ricerca all'estero, di aver partecipato a 2 progetti di ricerca di cui uno internazionale. Il candidato dichiara la partecipazione a numerosi congressi nazionali ed internazionali di cui 4 come "invited speaker".

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è molto buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica nel 2004 presso l'Università delgi Studi di Milano con la votazione di 110/110 e Lode, dove successivamente ha conseguito il Dottorato di ricerca in

Scienze Chimiche (titolo: della tesi di dottorato: "Chemical and Magnetic Studies on Tridentate Schiff Base Cu(II) Complexes and Nonlinear Optical Studies on Salen-Type Cu(II) Complexes and Ru(II) Alkynyl Organometallics") nel 2007. Sempre nel 2007 ha conseguito l'Abilitazione all'esercizio della professione di chimico.

Nella tornata del 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1. Ha usufruito di diversi assegni di ricerca, di cui uno presso l'Università degli Studi di Milano, uno presso l'Università degli Studi di Firenze e due presso l'Università degli Studi UniMoRE. Dal 01 dicembre 2012 al 30 novembre 2015 dichiara di aver ricoperto il ruolo di RTD-A presso UniMoRe, ma non specifica in quale SSD. Attualmente è borsista di ricerca presso la stessa Università. Ha svolto diversi periodi di ricerca all'estero. Dal 2011 ha prestato numerosi periodi di assistenza alla didattica di laboratorio e nel periodo marzo – giugno 2014, e marzo-giugno 2015 ha ricoperto il ruolo di docente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica Superiore, Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE). E' stato correlatore di 14 tesi triennali e 11 tesi magistrali, contro-relatore di 3 tesi triennali e cosupervisore di uno studente erasmus. Svolge attività di revisore per numerose riviste internazionali, Ha partecipato a un progetto di collaborazione tra Italia e Australia e a un proposal accettato presso il sincrotrone Elettra. Ha partecipato a numerosi congressi e convegni nazionali e internazionali: in particolare ha presentato 4 conferenze su invito e 9 comunicazioni orali. Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è molto buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Il candidato ha conseguito il diploma di laurea (V. O.) in Chimica nel 2004 presso l'Università degli studi di Milano (UniMI) con voto 110/110 e lode ed il dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2007 presso la stessa università con una tesi dal titolo "Chemical and Magnetic Studies on Tridentate Schiff Base Cu(II) Complexes and Nonlinear Optical Studies on Salen-Type Cu(II) Complexes and Ru(II) Alkynyl Organometallics".

Nel 2018 il candidato ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1. Ha inoltre conseguito nel 2007 l'Abilitazione all'esercizio della professione di chimico.

Ha svolto attività didattica congruente con l'SSD CHIM/03. E' stato docente di laboratorio per il Corso di Chimica Inorganica Superiore per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche negli anni 2014 e 2015. Ha svolto attività didattica come esercitatore per il corso di Chimica Generale per i corsi di laurea della Facoltà di Agraria (UniMI) e come assistente di laboratorio per il corso di Chimica Generale (Corso di Laurea in Biologia, UniMI), per il corso di Chimica Analitica Strumentale del corso di laurea in Biotecnologie (UniMI), per il corso di Chimica Inorganica Superiore del corso di laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE), per il corso di Chimica Inorganica I del corso di laurea Triennale in chimica (UniMORE).

Dichiara di essere stato titolare di un assegno di ricerca Post Doc (2007-2011) presso UniMil, Dipartimento di Chimica, di un assegno di ricerca (2011-2012) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Firenze, di un assegno di ricerca (2015-2016) presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'Università UniMORE, di un assegno di ricerca (2017-2018) presso lo stesso Dipartimento. Dichiara inoltre di essere titolare di una borsa di ricerca (aprile 2018-gennaio 2019), presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'Università UniMORE.

Dichiara di essere stato ricercatore RTD-A nel periodo 2012-2015 presso UniMORE, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche. Il candidato dichiara di aver svolto parte del dottorato (2006-2007) presso la Australian National University, di aver svolto un periodo di soggiorno di ricerca presso la Universiteit Leiden e di essere stato "visiting fellow" durante il Post-Doc presso la Australian National University (novembre 2009-gennaio 2010). Il candidato dichiara di aver partecipato a n. 2 progetti di cui un Sincrotrone Elettra Proposal e uno internazionale. Il candidato è membro della SCI, della American Chemical Society e della Royal society of Chemistry. Dichiara inoltre di far parte del Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, INSTM. Presenta due premi internazionali e dichiara la partecipazione a n. 4 congressi nazionali ed internazionali come invited speaker e n. 9 come oratore.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è molto buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Sono stati considerati i dati bibliometrici forniti dal candidato e presi dalla banca dati SCOPUS.

- Rigamonti L., Forni A., Pievo R., Reedijk J., Pasini, A. Synthesis, crystal structures and magnetic properties of dinuclear copper(II) compounds with NNO tridentate Schiff base ligands and bridging aliphatic diamine and aromatic diimine linkers. *Dalton Trans.* 2011, 40, 3381–3393, DOI: 10.1039/c0dt01304h, Royal Society of Chemistry (RSC). (IF 3.838, numero citazioni = 16, Q1).
- 2. Rigamonti L., Rusconi M., Forni A., Pasini A. The role of the atomic charges on the ligands and platinum(II) in affecting the *cis* and *trans* influences in [PtXL(PPh3)2]+ complexes (X = NO3, Cl, Br, I; L = 4-substituted pyridines, amines, PPh3). A 31P NMR and DFT investigation. *Dalton Trans*. 2011, 40, 10162–10173, DOI: 10.1039/c1dt10963d, Royal Society of Chemistry (RSC). (IF 3.838, numero citazioni = 13, Q1.
- **3.** Rigamonti L., Forni A., Pievo R., Reedijk J., Pasini A. Copper(II) compounds with NNO tridentate Schiff base ligands: effect of subtle variations in ligands on complex formation, structures and magnetic properties. *Inorg. Chim. Acta* 2012, 387, 373–382, DOI: 10.1016/j.ica.2012.02.030, Elsevier. (IF 1.687, numero citazioni = 9, Q2).
- **4.** Rigamonti L., Carlino S., Halibi Y., Demartin F., Castellano C., Ponti A., Pievo R., Pasini A. Copper 1D coordination polymers and dimers: role of the carboxylate and the ammonium cation, crystal structures and magnetic studies. *Polyhedron* 2013, *53*, 157–165, DOI: 10.1016/j.poly.2013.01.016, Elsevier. (IF 2.047, numero citazioni = 13, Q2).
- **5. Rigamonti L.**; Piccioli M., Malavolti L., Poggini L., Mannini M., Totti F., Cortigiani B., Magnani A., Sessoli R., Cornia A. Enhanced vapor-phase processing in fluorinated Fe4 single-molecule magnets. *Inorg. Chem.* 2013, *52*, 5897–5905, DOI: 10.1021/ic400037c, American Chemical Society (ACS). (IF 4.794, numero citazioni = 20, Q1).
- 6. Rigamonti L., Cornia A., Nava A., Boulon M-E., Perfetti M., Barra A-L., Zhong X., Park K., Sessoli R. Mapping of single-site anisotropy tensors in weakly coupled spin clusters by torque magnetometry. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014, 16, 17220–17230, DOI:10.1039/c4cp02462a, Royal Society of Chemistry (RSC). (IF 4.493, numero citazioni = 16, Q1)
- 7. Cornia, Andrea; Rigamonti, Luca; Boccedi, Simone; Clerac, Rodolphe; Rouzieres, Mathieu; Sorace, Lorenzo. Magnetic blocking in extended metal atom chains: a pentachromium(II) complex as a single-molecule magnet *Chem. Commun.* 2014, 50, 15191–15194, DOI: 10.1039/c4cc06693f. (IF 6.834, numero citazioni = 18, Q1).
- **8.** Nava A:, **Rigamonti L.,** Zangrando E., Sessoli R., Wernsdorfer W., Cornia A. Redox-controlled exchange bias in a supramolecular chain of Fe4 single-molecule magnets. Angew. Chem. Int. Ed. 2015, *54*, 8777-8782, DOI: 10.1002/anie.201500897, Wiley-VCH.: (IF 11.709, numero citazioni = 16, Q1).
- 9. Rigamonti L., Nava A., Boulon M.-E., Luzon J., Sessoli R., Cornia A. Experimental and theoretical studies on the magnetic anisotropy in lanthanide(III)-centred Fe3Ln propellers (Ln = Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb). *Chem. Eur. J.* 2015, *21*, 12171–12180, DOI:10.1002/chem.201501400, Wiley-VCH. (IF 5.771, numero citazioni = 4, Q1).
- **10. Rigamonti L.,** Nava. A., Cotton C., Lang H., Rüffer T., Perfetti M., Sorace L., Barra, A-L., Lan Y., Wernsdorfer W., Sessoli R., Cornia A. Diamondoid structure in a metal-organic framework of Fe4 single-molecule magnets. *Chem. Eur. J.* 2016, *22*, 13705–13714, DOI: 10.1002/chem.201601383, Wiley-VCH. (IF 5.317, numero citazioni = 5, Q1).
- **11.** Bridonneau N., **Rigamonti L.***, Poneti G., Pinkowicz D., Forni A., Cornia A. Evidences of crystal packing effects in stabilizing high or low spin state of iron(II) complexes with functionalized 2,6-bis(pyrazol-1-yl)pyridine ligands. *Dalton Trans.* 2017, *46*, 4075–4085, DOI: 10.1039/c7dt00248c, Royal Society of Chemistry (RSC). (IF 4.099, numero citazioni = 6, Q1).
- **12. Rigamonti L.**, Piccioli M., Nava A., Malavolti L., Cortigiani B., Sessoli R., Cornia A. Structure, magnetic properties and thermal sublimation of fluorinated Fe4 single-molecule

- magnets *Polyhedron* 2017, 128, 9–17, DOI: 10.1016/j.poly.2017.02.036, Elsevier. (IF 2.067, numero citazioni = 2, Q2).
- **13. Rigamonti L.**, Forni A., Sironi M., Ponti A., Ferretti A. M., Baschieri C., Pasini A. Experimental and theoretical investigations on magneto-structural correlation in trinuclear copper(II) hydroxido propellers. *Polyhedron* 2018, 145, 22–34, DOI:10.1016/j.poly.2018.01.028, Elsevier. (IF 2.067, numero citazioni = 0, Q2).
- **14.** Salinas A. J., Malavasi G., Sánchez-Salcedo S., Lusvardi G., **Rigamonti L.**, Menabue L., Vallet-Regi M. Highly-bioreactive silica-based mesoporous bioactive glasses enriched with gallium(III). *Materials* 2018, *11*, 367:1–367:17, DOI: 10.3390/ma11030367, MDPI. (IF 2.467, numero citazioni = 0, Q2).
- **15. Rigamonti L.**, Orteca G., Asti M., Basile V., Imbriano C., Saladini M., Ferrari E. New curcumin-derived ligands and their affinity towards Ga3+, Fe3+ and Cu2+: spectroscopic studies on complex formation and stability in solution. *New J. Chem.* 2018, *42*, 7680–7690, DOI: 10.1039/C8NJ00535D, Royal Society of Chemistry (RSC). (IF 3.201, numero citazioni = 1, Q1).
- 16. Rigamonti L., Bridonneau N., Poneti G., Tesi L., Sorace L., Pinkowicz D., Jover J., Ruiz E., Sessoli R., Cornia A. A pseudo-octahedral cobalt(II) complex with bis-pyrazolylpyridine ligands acting as a zero-field single-molecule magnet with easy axis anisotropy. *Chem. Eur. J.* 2018, 24, 8857–8868, DOI: 10.1002/chem.201801026, Wiley-VCH. (IF 5.160, numero citazioni = 0, Q1).
 - (*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

A. originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

B. congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 - Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena, parziale scarsa);

C. rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

D. apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso); **giudizio complessivo (A+B+C+D)** (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = parziale; C = buono; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

: A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = parziale; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 3:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 5:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A: eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; gudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A: eccellente; B = parziale; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 14:

A: eccellente; B = piena; C: buono; D: significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D: primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato ha pubblicato il primo articolo scientifico nel 2006. Dichiara di aver pubblicato n. 29 lavori, corrispondenti ad una media di circa 2.42 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor di 117.929 corrispondente ad un valore medio per pubblicazione di 4.067, calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di aver ottenuto un totale di 444 citazioni (numero medio di citazioni per pubblicazione 15.31) che gli consentono di avere un H-index di 13.

Valutazione sulla produzione complessiva (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività di ricerca del candidato, continuativa nel tempo e in generale congruente con il SSD CHIM/03, include principalmente la sintesi, la caratterizzazione con numerose tecniche analitiche, e lo studio di composti organometallici e complessi di metalli di transizione sia molecolari che polinucleari con particolari proprietà magnetiche e ottiche. Buona parte delle pubblicazioni presentate ai fini della valutazione ha una collocazione editoriale su riviste a diffusione internazionale del primo quartile a supporto di una buona originalità, valenza scientifica e rigore metodologico. Il contributo individuale è rilevante considerando che in 13 delle 16 pubblicazioni presentate, tutte condotte in collaborazione sia nazionale che internazionale, il candidato è primo autore o autore di riferimento.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

L'attività di ricerca del candidato comprende la sintesi e caratterizzazione di composti di coordinazione, organometallici, complessi di metalli di transizione, magneti a singola molecola (SMMs), complessi polinucleari, metal-organic frameworks (MOFs), e lo studio di altri materiali sia di origine naturale sia sintetica, per cui si avvale di una varietà di tecniche analitiche.

L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di buona parte delle 16 pubblicazioni presentate e nel discreto numero di citazioni ottenute. Il candidato è primo autore in n. 13 delle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale e internazionale, da cui si evince un contributo individuale significativo. La consistenza scientifica della produzione complessiva è buona, sviluppata con continuità temporale, e in generale congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva del candidato è molto buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Gli interessi di ricerca del candidato possono essere riassunti dalle seguenti parole chiave: sintesi organica, sintesi inorganica, composti di coordinazione, organometallica, ottica non lineare (NLO), proprietà magnetiche, magneti a singola molecola (SMMs), correlazione struttura-proprietà, basi di Schiff, funzionalizzazione di leganti, complessi polinucleari, metalli di transizione, lantanidi, spin crossover (SCO), metal-organic frameworks (MOFs), curcumina e derivati naturali e sintetici, morbo di Alzheimer, radiofarmaci, cerio, biovetri. La produzione scientifica del candidato risulta in generale congruente con il SSD CHIM/03 del bando. La consistenza scientifica della produzione complessiva è buona, sviluppata con continuità temporale. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di 11 delle 16 pubblicazioni presentate e nel discreto numero di citazioni ottenute. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta significativo, risultando il candidato primo autore in n. 13 pubblicazioni.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

Il candidato ha conseguito il diploma di laurea in Chimica nel 2004 presso l'Università degli Studi di Milano (UniMI) con la votazione di 110/110 e Lode, ed il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche nel 2007 presso la stessa università con una tesi dal titolo "Chemical and Magnetic Studies on Tridentate Schiff Base Cu(II) Complexes and Nonlinear Optical Studies on Salen-Type Cu(II) Complexes and Ru(II) Alkynyl Organometallics"). Sempre nel 2007 ha conseguito l'Abilitazione all'esercizio della professione di chimico.

Nel 2018 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per il Settore Concorsuale 03/B1. Dichiara di essere stato titolare di un assegno di ricerca "Post Doc" presso il Dipartimento di Chimica (UniMi), di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica (UniFI), di due assegni di ricerca e di una borsa di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche (UniMORE

Dal 01 dicembre 2012 al 30 novembre 2015 dichiara di aver ricoperto il ruolo di RTD-A presso UniMoRe (Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche), ma non specifica in quale SSD. Attualmente borsista di ricerca presso la stessa Università.

E' stato docente di laboratorio (2014 e 2015) per il Corso di Chimica Inorganica Superiore per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE). Ha svolto attività didattica anche come esercitatore per il corso di Chimica Generale per i corsi di laurea della Facoltà di Agraria (UniMI) e come assistente di laboratorio per il corso di Chimica Generale (Corso di Laurea in Biologia, UniMI), per il corso di Chimica Analitica Strumentale del corso di laurea in Biotecnologie (UniMI), per il corso di Chimica Inorganica Superiore del corso di laurea Magistrale in Scienze Chimiche (UniMORE), per il corso di Chimica Inorganica I del corso di laurea Triennale in chimica (UniMORE). Tutta l'attività didattica universitaria dichiarata è congruente con l'SSD CHIM/03.

E' stato correlatore di 14 tesi triennali e 11 tesi magistrali, contro-relatore di 3 tesi triennali e cosupervisore di uno studente erasmus. Svolge attività di reviewer per numerose riviste internazionali. Il candidato dichiara di aver svolto tre periodi di soggiorno di ricerca all'estero, di aver partecipato a 2 progetti di ricerca di cui uno internazionale. Ha partecipato a numerosi congressi e convegni nazionali e internazionali: in particolare ha presentato 4 conferenze su invito e 9 comunicazioni orali. Il candidato è membro della SCI, della American Chemical Society e della Royal society of Chemistry. Dichiara inoltre di far parte del Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, INSTM. Presenta due premi internazionali. Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è molto buono.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 8:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 10:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; gudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A: eccellente; B = parziale; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A: eccellente; B = piena; C: buono; D: significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D: primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività di ricerca del candidato include principalmente la sintesi e caratterizzazione con numerose tecniche analitiche e lo studio di organometallici e complessi di metalli di transizione, sia molecolari che polinucleari con particolari proprietà magnetiche e ottiche. L'originalità, la valenza

scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di buona parte delle 16 pubblicazioni presentate e nel discreto numero di citazioni ottenute. Il candidato è primo autore in n. 13 delle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale e internazionale, da cui si evince un contributo individuale significativo. La consistenza scientifica della produzione complessiva è buona, continuativa nel tempo ed in generale congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio complessivo sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

CANDIDATO: SALASSA Giovanni

TITOLI PRESENTATI

- 1. Laurea triennale in Chimica conseguita nel 2007 presso l'Università degli studi di Torino con voti 104/110.
- 2. Titolo di studio: Laurea Magistrale in Chimica conseguito il 11/03/2009 presso l'Università degli studi di Torino con votazione di 110/110 (allega certificato con votazione esami).
- **3.** Dottorato di Ricerca conseguito il 25/07/2013 presso l'Università Rovira i Virgili (Tarragona, Spagna)
- **4.** Titolo della Tesi: Supramolecular, Photophysical and Catalytic Properties of Zn(salphen) Complexes and Materials. (titolo dichiarato)
- **5.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1, conseguita il 04/04/2018.

ESPERIENZE PROFESSIONALI

- **6.** 2009-2013 Institute of Chemical research of Catalonia (ICIQ) Doctoral fellowship (titolo dichiarato)
- 7. 2013-2015 Università di Padova postdoctoral fellowship. (titolo dichiarato) VALUTABILE
- 8. 2016-2017 Université de Genève postdoctoral fellowship. (titolo dichiarato) VALUTABILE
- **9.** 2017-2019 Université de Genève Maria Sklodowska-Curie Action postdoctoral fellowship. (titolo dichiarato)

ATTIVITA' DIDATTICA

10. 2014 Università di Padova Didactic laboratory of organic chemistry, first year of Chemistry course. (titolo dichiarato)

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

- **11.** 2011 Best poster presentation at the Zing Coordination Chemistry Conference; Xcaret (Mexico). (titolo dichiarato)
- **12.** 2016 Best poster presentation at the International Conference on Self-Assembly in Confined Spaces (SACS16), San Sebastian (Spain). (titolo dichiarato)
- **13.** 2017 Best oral presentation at the International Symposium on Monolayer-Protected Clusters (ISMPC17), Monte Verità (Switzerland). (titolo dichiarato)
- 14. 2016 ad oggi Swiss chemical society member.

FINANZIAMENTI

- 15. Il candidato dichiara la partecipazione ai seguenti finanziamenti
- 2010 FPU doctoral fellowship, 4 years
- 2017 Marie Sklodowska-Curie Action individual fellowship, 2 years

BREVETTI

16. 1 domanda di brevetto nazionale. (titolo dichiarato)

17. 1 brevetto internazionale. (titolo dichiarato)

RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

18. Il candidato dichiara la partecipazione a congressi nazionali ed internazionale di cui 12 comunicazioni orali ed 11 poster.

Valutazione sui titoli

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Dopo il conseguimento del diploma di Laurea Magistrale in Chimica nel 2009 presso l'Università degli Studi di Torino (110/110), il candidato dichiara di aver conseguito il dottorato di ricerca nel 2013 presso l'Università Rovira i Virgili (Tarragona, Spagna) con una tesi dal titolo "Supramolecular, Photophysical and Catalytic Properties of Zn (salphen) Complexes and Materials".

Nel 2018 ha conseguito l'abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per il Settore Concorsuale 03/B1.

La limitata attività didattica in ambito universitario svolta dal candidato non è pertinente al SSD CHIM/03.

Il candidato dichiara di aver svolto attività di "Post-Doc" presso l'Università di Padova, l'Université de Genève e l'Université de Genève Maria Sklodowska-Curie Action, e di aver partecipato a 2 progetti di finanziamento internazionali.

Il candidato dichiara un brevetto nazionale ed un brevetto internazionale, e la partecipazione come oratore a 12 congressi nazionali ed internazionali.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Il candidato ha conseguito la laurea in Metodologie Chimiche Avanzate nel 2009 presso l'Università degli Studi di Torino con la votazione di 110/110, e il Dottorato di ricerca in Scienza e Tecnologia Chimica (titolo della tesi di dottorato: "Supramolecular, Photophysical and Catalytic Properties of Zn(salphen) Complexes and Materials") presso l'Università Rovira i Virgili (Tarragona, spagna) nel 2013. Nella tornata del 2017 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di Il Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1. Nel 2014 ha svolto una limitata attività didattica non congruente con il SSD CHIM/03.

Ha usufruito di una borsa di dottorato presso l'Institute of Chemical research of Catalonia e di due borse post-doc presso Università di Padova (2013-2015) e presso Université de Genève (2016-2017). Nel 2017 ha vinto una Marie Sklodowska-Curie Action individual fellowship per due anni (2017-2019). Dichiara inoltre di aver partecipato a n. 2 finanziamenti internazionali.

Ha partecipato a congressi nazionali ed internazionali presentando 12 comunicazioni orali e 11 poster. Ha vinto un premio per la miglior presentazione orale e 2 come miglior poster in tre convegni internazionali, Non presenta attività brevettuale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è discreto.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Il candidato ha conseguito il diploma di laurea magistrale in Chimica nel 2009 presso l'Università degli studi di Torino, con voto di 110/110 e media degli esami 27.5/30, ed il dottorato di ricerca nel 2013 presso l'Università Rovira i Virgili (Tarragona, Spagna) con una tesi dal titolo "Supramolecular, Photophysical and Catalytic Properties of Zn(salphen) Complexes and Materials" (titolo non trasmesso).

Nel 2018 il candidato ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1. Il candidato ha svolto una limitata attività didattica in ambito universitario non pertinente al SSD CHIM/03.

Il candidato dichiara di aver svolto attività di dottorato presso l'Institute of Chemical research of Catalonia e attività di post-doc presso Università di Padova (2013-2015), Université de Genève

(2016-2017) e l'Université de Genève Maria Sklodowska-Curie Action (2017-2019). Dichiara inoltre di aver partecipato a n. 2 finanziamenti internazionali.

Il candidato dichiara un brevetto nazionale ed un brevetto internazionale. Dichiara tre premi internazionali ed è membro della Swiss chemical society. Dichiara infine di aver partecipato come oratore a n. 12 congressi nazionali ed internazionali.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è discreto.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

I dati bibliografici sono stati determinati dalla commissione e presi dalla banca dati SCOPUS.

- 1. S. J. Wezenberg, **G. Salassa**, E. C. Escudero-Adán, J. Benet-Buchholz, A. W. Kleij. Effective Chirogenesis in a Bis(metallosalphen) Complex through Host-Guest Binding with Carboxylic Acids. Angew. Chem. Int. Ed. 2011, 50, 713–716. (*Back Cover Illustration*) (I.F. 13.455, numero citazioni= 78, Q1).
- **2. G. Salassa**, A. M. Castilla, A. W. Kleij. Cooperative Self-Assembly of a Macrocyclic Schiff Base Complex. Dalton Trans. 2011, 40, 5236–5243. (I.F. 3.838, numero citazioni= 25, Q1).
- **3.** C. J. Whiteoak, **G. Salassa**, A. W. Kleij. Recent advances with π-conjugated salen systems. Chem. Soc. Rev. 2012, 41 (2), 622-631. (I.F. 24.892, numero citazioni= 135, Q1).
- **4. G. Salassa**, M. J. J. Coenen, S. J. Wezenberg, B. L. M. Hendriksen, S. Speller, J. A. A. W. Elemans, A. W. Kleij. Extremely Strong Self-Assembly of a Bimetallic Salen Complex Visualized at the Single-Molecule Level. J. Am. Chem. Soc. 2012, *134* (16), 7186-7192. (I.F. 10.677, numero citazioni= 49, Q1).
- **5.** M. V. Escárcega-Bobadilla, **G. Salassa**, M. Martinez Belmonte, E. C. Escudero-Adan, A. W. Kleij. Versatile Switching in Substrate Topicity: Supramolecular Chirality Induction in Diand Trinuclear Host Complexes. Chem. Eur. J. 2012, 18 (22), 6805-6810. (I.F. 5.831, numero citazioni= 16, Q1).
- **6.** F. Castro-Gómez, **G. Salassa**, A. W. Kleij, C. Bo. A DFT Study on the Mechanism for the Cycloaddition Reaction of CO2 to Epoxides Catalyzed by Zn(salphen) Complexes. Chem. Eur. J. 2013, *19*, 6289-6298. (I.F. 5.696, numero citazioni= 130, Q1).
- 7. D. Anselmo, **G. Salassa**, E. C. Escudero-Adán, E. Martin, A. W. Kleij. Merging Catalysis and Supramolecular Aggregation Features of Triptycene based Zn(salphen)s. Dalton Trans. 2013, *42*, 7962-7970. (I.F. 4.097, numero citazioni= 11, Q1).
- **8. G. Salassa**, J. W. Ryan, E. C. Escudero-Adán, A. W: Kleij. Spectroscopic Properties of Zn(Salphenazine) Complexes and their Application in Small Molecule Organic Solar Cells. Dalton Trans. 2014, *43*, 210-221. (I.F. 4.197, numero citazioni= 11, Q1).
- **9.** A. Piserchia, M. Zerbetto, M.-V. Salvia, **G. Salassa**, L. Gabrielli, F. Mancin, F. Rastrelli, D. Frezzato. Conformational mobility in monolayer-protected nanoparticles: from torsional free energy profiles to NMR relaxation. J. Phys. Chem. C. 2015, *119* (34), 20100-20110. (I.F. 4.509, numero citazioni= 5, Q1).
- **10.** M.-V. Salvia, **G. Salassa**, F. Rastrelli, F. Mancin. Turning supramolecular receptors into chemosensors by nanoparticle-assisted -NMR chemosensing-. J. Am. Chem. Soc. 2015, 137 (35), 11399-11406. (I.F. 13.038, numero citazioni= 7, Q1).
- **11.** B. Zhang, **G. Salassa**, T. Bürgi. Silver migration between Au38(SC2H4Ph)24 and doped AgxAu38-x(SC2H4Ph)24 nanoclusters. Chem. Commun. 2016, *52*, 9205-9207. (Front Cover Illustation) (I.F. 6.319, numero citazioni= 13, Q1).
- **12.** A. Sels, **G. Salassa**, S. Pollitt, C. Guglieri, G. Rupprechter, N. Barrabés, T. Bürgi. Structural investigation of ligand exchange reaction with rigid dithiol on doped (Pt, Pd) Au25 clusters. J Phys. Chem. C. 2017, *121*, 10919-10926. (I.F. 4.484, numero citazioni= 5, Q1).
- **13. G. Salassa***, A. Sels, F. Mancin, T. Bürgi. Dynamic Nature of Thiolate Monolayer in Au25(SR)18 Nanoclusters. ACS Nano 2017, *11*, 12609–12614. (I.F. 13.709; numero citazioni= 5, Q1).
- **14.** B. Zhang, O. V. Safonova, S. Pollitt, **G. Salassa**, A. Sels, R. Kazan, Y. Wang, G. Rupprechter, N. Barrabés, T. Bürgi. On the mechanism of rapid metal exchange between thiolate-protected gold and gold/silver clusters: a time-resolved in situ XAFS study. Phys. Chem. Chem. Phys. 2018, *20*, 5312-5318. (I.F. 3.906, numero citazioni= 1, Q1).

- **15.** A. Sels, **G. Salassa**, F. Cousin, L. Lay-Theng, T. Bürgi. *Covalently bonded multimers of Au25(SBut)18 as a conjugated system*", Nanoscale 2018, *10*, *12754–12762*. (I.F. 7.233, numero citazioni= 0, Q1).
- **16. G. Salassa***, T. Bürgi. NMR spectroscopy: A potent tool for studying monolayer-protected metal nanoclusters. Nanoscale Horiz. 2018, *3, 457-463.* (I.F. 9.391, numero citazioni= 0, Q1).
 - (*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

A. originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

B. congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 - Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena, parziale scarsa);

C. rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);

D. apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso); **giudizio complessivo (A+B+C+D)** (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6.

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 7:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9

A: eccellente; B = parziale; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = BUONO.

Pubblicazione N. 10:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 12:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14.

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = OTTIMO.

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = OTTIMO.

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato ha pubblicato il primo articolo scientifico nel 2008. Dichiara di aver pubblicato n. 21 lavori, corrispondenti ad una media di circa 2.1 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor di 156.767 corrispondente ad un valore medio per pubblicazione di 7.838, calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di aver ottenuto un totale di 639 (numero medio di citazioni per pubblicazione 26.63) che gli consentono di avere un H-index di 11.

<u>Valutazione sulla produzione complessiva</u> (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività scientifica del candidato si è rivolta alla studio sia di variegati complessi metallici per applicazioni ottiche e catalitiche e supramolecolari che di sistemi nanostrutturati con potenziali applicazioni nel campo della sensoristica e della catalisi. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono molto buone, come evidenziato dalla collocazione editoriale delle riviste tutte a diffusione internazionale del primo quartile e dal significativo numero di citazioni medio per pubblicazione ottenuto. La produzione scientifica è complessivamente buona, sviluppata con continuità temporale e congruente con il SSD CHIM/03. L'apporto individuale del candidato alla ricerca è chiaramente enucleabile e significativo essendo in 5 delle 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione primo autore o autore di riferimento.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è molto buono.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

L'attività scientifica del candidato si è articolata nello studio della fotochimica di complessi metallici per applicazioni biomediche, supramolecolari, ottiche e catalitiche, e della reattività di nanoparticelle e nano cluster metallici per la preparazione di nuovi materiali con potenziali applicazioni nel campo della sensoristica e della catalisi.

Le 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione, denotano buona originalità, valenza scientifica, e rigore metodologico, in accordo con la collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di tutte le pubblicazioni presentate, e nel significativo numero di citazioni ottenute da buona parte delle stesse. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione a carattere prevalentemente internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, dal momento che il candidato è autore di riferimento o primo autore in n.5 pubblicazioni.

La consistenza scientifica della produzione complessiva è molto buona, sviluppata con continuità temporale e per lo più congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è molto buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

L'attività scientifica del candidato ha riguardato durante il periodo di tesi o studio della fotochimica di complessi di rutenio mediante metodi spettroscopici e calcoli di tipo DFT. Durante il periodo di dottorato si è occupato della preparazione di complessi di zinco della (N,N'-bis(salicilidene)-1,2-fenillendiammina) per applicazioni supramolecolari, ottiche e catalitiche. Successivamente ha svolto studi riguardanti l'uso di tecniche NMR per caratterizzare la natura dei monolayer di tioli su nano particelle di oro. Attualmente la sua attività scientifica è allo studio della reattività di nano cluster metallici per la preparazione di nuovi materiali con potenziali applicazioni nel campo della sensoristica e della catalisi. La produzione scientifica del candidato risulta essere in buona parte

congruente con il SSD CHIM/03 del bando. La consistenza scientifica della produzione complessiva è molto buona, sviluppata con continuità temporale. L'originalità, la valenza scientifica, ed il rigore metodologico dell'attività di ricerca sono buone, come riscontrato nella collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di tutte le pubblicazioni presentate, e nel significativo numero di citazioni ottenute. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale e internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, risultando il candidato autore di riferimento o primo autore in n.5 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è buono.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

Il candidato ha conseguito la laurea in Metodologie Chimiche Avanzate nel 2009 presso l'Università degli Studi di Torino con la votazione di 110/110 e media degli esami 27.5/30, ed il Dottorato di ricerca in Scienza e Tecnologia Chimica (titolo della tesi di dottorato: "Supramolecular, Photophysical and Catalytic Properties of Zn(salphen) Complexes and Materials") presso l'Università Rovira i Virgili (Tarragona, Spagna) nel 2013.

Nel 2018 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per il Settore Concorsuale 03/B1.

La limitata attività didattica in ambito universitario svolta dal candidato non è pertinente al SSD CHIM/03.

Ha usufruito di una borsa di dottorato presso l'Institute of Chemical research of Catalonia e di due borse post-doc presso Università di Padova (2013-2015) e presso Université de Genève (2016-2017). Nel 2017 ha vinto una Marie Sklodowska-Curie Action individual fellowship per due anni (2017-2019). Dichiara inoltre di aver partecipato a n. 2 finanziamenti internazionali.

Ha partecipato a congressi nazionali ed internazionali presentando 12 comunicazioni orali e 11 poster. Ha vinto un premio per la miglior presentazione orale e 2 come miglior poster in tre convegni internazionali. Il candidato dichiara un brevetto nazionale ed un brevetto internazionale Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dal candidato è discreto.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 6:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A: eccellente; B = parziale; C = ottim; D = significativo; giudizio complessivo = **BUONO**.

Pubblicazione N. 10:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 11:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo, giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 14.

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = OTTIMO.

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 16:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività scientifica del candidato si è articolata nello studio della fotochimica di complessi metallici per applicazioni biomediche, supramolecolari, ottiche e catalitiche, e della reattività di nanoparticelle e nano cluster metallici per la preparazione di nuovi materiali con potenziali applicazioni nel campo della sensoristica e della catalisi.

Le 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione, denotano buona originalità, valenza scientifica, e rigore metodologico, in accordo con la collocazione editoriale a riviste a diffusione internazionale del primo quartile (Q1) di tutte le pubblicazioni presentate, e nel significativo numero di citazioni ottenute da buona parte delle stesse. L'apporto individuale del candidato alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione a carattere prevalentemente internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, dal momento che il candidato è autore di riferimento o primo autore in n.5 pubblicazioni.

La produzione scientifica è complessivamente molto buona, sviluppata con continuità temporale e congruente con il SSD CHIM/03 del bando.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva del candidato è molto buono.

CANDIDATA: VIOLA Elisa

TITOLI PRESENTATI

1. Titolo di studio: Laurea in Chimica conseguita il 28/05/2004 presso Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con votazione di 110/110 e lode; (allega certificato di laurea con votazione esami e lavoro di tesi).

- 2. Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, conseguito il 16/01/2008 presso Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
- **3.** Titolo della Tesi: Synthesis, structure, redox behaviour and potential photosensitizing properties of novel mono- and multimetallic porphyrazines. (titolo trasmesso).
- **4.** Conseguimento Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore 03/B1, conseguita il 04/04/2018 (si allegano i giudizi della commissione di abilitazione).
- **5.** Lettera di presentazione del Prof. Caludio Ercolani. (titolo trasmesso).
- **6.** Lettera di presentazione della Prof.ssa Maria Pia Donzello. (titolo trasmesso)
- **7.** 2013 Abilitazione all'insegnamento alla Scuola Secondaria di II grado classe A013 Chimica e Tecnologie Chimiche (certificata mediante dichiarazione, con allegata certificazione Sapienza). Votazione: 98/100. (titolo trasmesso)
- 8. 2017 2 certificati di corsi di Lingua Inglese rilasciati da "The New British Centre". (titolo trasmesso)
- **9.** 2010 Attestato di partecipazione al "5° Corso Nazionale di Introduzione alla Fotochimica". Università di Bologna. (titolo trasmesso)
- **10.** 2010 Attestato di partecipazione alla "2ª Scuola di Metodologie Chimiche: Moderne Metodologie Chimico-Fisiche per le Nuove Frontiere della Chimica". CNR-Istituto di Metodologie chimiche, Roma. (titolo trasmesso)
- **11.** 2008 Attestato di partecipazione al "7th International Symposium on Photodynamic Diagnosis and Therapy in Clinical Practice", nell'ambito del quale si è svolta la "Photodynamic Therapy School". Università di Padova, Università di Innsbruck. (titolo trasmesso)
- **12.** 2005 Attestato di partecipazione alla "X Scuola Nazionale per Dottorandi in Chimica Bioinorganica" della Società Chimica Italiana, Catania (titolo trasmesso)

ESPERIENZE PROFESSIONALI

- **13.** Contratto individuale di lavoro subordinato di diritto privato a tempo determinato Ricercatore Tipologia A, SSD CHIM/03 Legge 240/2010 (01/01/2016 31/12/2018). (titolo trasmesso)
- **14.** Contratto per Assegno di Ricerca del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" Legge 240/2010 (formale 01/04/2015 31/03/2016; effettivo 01/04/2015 31/12/2015). Progetto di Ricerca: "Applicazione di nuovi sistemi porfirazinici nell'ambito della sensoristica". (titolo trasmesso)
- **15.** Contratto per Assegno di Ricerca del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" Legge 240/2010 (formale 01/07/2012 30/06/2013; effettivo 01/07/2012 28/02/2014, per congedo di maternità e parentale). Progetto di Ricerca: "Nuovi macrocicli porfirazinici fotoattivi in terapia fotodinamica con potenzialità applicative anticancro bi- o multimodali" (rinnovo). (titolo trasmesso)
- **16.** Contratto per Assegno di Ricerca del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" Legge 240/2010 (01/07/2011 30/06/2012). Progetto di Ricerca: "Nuovi macrocicli porfirazinici fotoattivi in terapia fotodinamica con potenzialità applicative anticancro bi- o multimodali". (titolo trasmesso)
- 17. Contratto per borsa di studio con il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (01/06/2010 30/09/2010). Progetto di Ricerca: "Attività fotochimica e comportamento spettroscopico di macrocicli porfirazinici ad elevata delocalizzazione elettronica". (titolo trasmesso)
- 18. Contratto per assegno di Ricerca conferito dall'Ateneo federato della Scienza e Tecnologia (AST), svolto presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (01/02/2009 31/01/2010). Progetto di Ricerca: "Ruolo di nuovi macrocicli porfirazinici come fotosensibilizzatori in Terapia Fotodinamica (PDT) e loro inserimento in sistemi biomimetici". (titolo trasmesso)
- **19.** Contratto per borsa di studio con il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (01/07/2008 30/11/2008). Progetto di Ricerca: "Nuove

- porfirazine come fotosensibilizzatori per la produzione di ossigeno di singoletto in terapia fotodinamica". (titolo trasmesso)
- 20. Contratto di lavoro a progetto con il Consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli dei Sistemi Biologici, CIRCMSB (01/04/2007 31/03/2008). Progetto di Ricerca: "Ruolo di nuovi macrocicli porfirazinici nella Terapia Fotodinamica". (titolo trasmesso)
- 21. Contratto di collaborazione coordinata e continuativa con il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (01/04/2006 31/03/2007). Progetto di Ricerca: "Terapia Fotodinamica e proprietà fotofisiche di sistemi tetrapirrolici". (titolo trasmesso)
- **22.** Contratto di lavoro con il Consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli dei Sistemi Biologici, CIRCMSB (16/02/2005 15/01/2006). Progetto di Ricerca: "Impiego di porfirazine idrosolubili nella Terapia Fotodinamica delle malattie degenerative". (titolo trasmesso)
- 23. Contratto di collaborazione coordinata e continuativa con il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (01/12/2004 31/12/2004). Progetto di Ricerca: "Approfondimenti nello studio delle proprietà redox di specie bimetalliche di composti ftalocianinici". (titolo trasmesso)
- 24. Incarico di collaboratore interno nell'ambito dell'accordo di collaborazione tra il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" e gli Istituti Fisioterapici Ospedalieri Istituto Santa Maria e San Gallicano (IFO-ISG), per iprogetto di ricerca: "Impiego della Terapia Fotodinamica (PDT) nel trattamento del biofilm in ceppi batterici multiresistenti. (titolo trasmesso)

ATTIVITA' DIDATTICA

- **25.** a.a. 2017/2018 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Corso di Laurea Triennale in Fisica, docente titolare del Corso di Chimica (CHIM/03, 6 CFU) (titolo dichiarato).
- **26.** a.a. 2017/2018 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Corso di Laurea Triennale in Chimica, Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio (CHIM/03, 3 CFU dei 12 CFU totali). (titolo dichiarato)
- **27.** a.a. 2016/2017 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Corso di Laurea Triennale in Fisica, docente titolare del Corso di Chimica (CHIM/03, 6 CFU) (titolo dichiarato).
- **28.** a.a. 2015/2016 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Corso di Laurea Triennale in Fisica, docente titolare del Corso di Chimica (CHIM/03, 6 CFU) (titolo dichiarato).
- **29.** a.a. 2015/2016 Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie Agro-Industriali, Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica (CHIM/03, 3 CFU). (titolo dichiarato)
- 30. Conferimento di incarico di collaborazione autonoma coordinata e continuativa per lo svolgimento di assistenza alla didattica per l'a.a. 2016/2017 all'insegnamento di Chimica Organica (CHIM/06) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma, per la durata dell'intero anno accademico. (titolo trasmesso)
- **31.**Conferimento di incarico per attività d'orientamento e tutorato (a.a. 2015/2016) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Organica (CHIM/06) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma, per la durata dell'intero anno accademico. (titolo trasmesso)
- **32.** Conferimento di incarico per attività d'orientamento e tutorato (a.a. 2014/2015) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Organica (CHIM/06) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma, per la durata dell'intero anno accademico. (titolo trasmesso)
- **33.** Attività pluriennale di assistenza in laboratorio durante le esercitazioni didattiche per corsi 3 di Chimica Generale ed Inorganica (CHIM/03) e di Chimica Organica (CHIM/06) di varie Università (titolo dichiarato).

- **34.** Conferimento di incarico per attività d'orientamento e tutorato (a.a. 2012/2013 nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica (CHIM/03) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma, per la durata dell'intero anno accademico. (titolo trasmesso)
- **35.**Conferimento di incarico per attività d'orientamento e tutorato (a.a. 2011/2012) nell'ambito degli insegnamenti di Chimica Generale (CHIM/03) e di Chimica Organica (CHIM/06) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma, per la durata dell'intero anno accademico. (titolo trasmesso)
- **36.** Precorsi di Chimica Generale CHIM/03 (Settembre 2009, Settembre 2010 e Settembre 2011) per il Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma (titolo dichiarato).
- **37.** Conferimento di incarico per attività d'orientamento e tutorato (a.a. 2010/2011) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Generale (CHIM/03) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma, per la durata dell'intero anno accademico. (titolo trasmesso)
- **38.** Contratto per collaborazione coordinata e continuativa per attività di tutorato (40 ore, a.a. 2010/2011) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica (CHIM/03) del Corso di Laurea in Biotecnologie Agro-Industriali, Università degli Studi di Roma "La Sapienza". (titolo trasmesso)
- **39.** Conferimento di incarico per attività d'orientamento e tutorato (a.a. 2009/2010) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Generale (CHIM/03) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma, per la durata dell'intero anno accademico. (titolo trasmesso)
- 40. Contratto per collaborazione coordinata e continuativa per attività di tutorato, didattico integrativa, propedeutica e di recupero (150 ore, a.a. 2008/2009) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica (CHIM/03) del Corso di Laurea di Chimica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza". (titolo trasmesso)
- **41.** Precorso di Chimica Generale tenuto nel Settembre 2008 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" rivolto agli immatricolandi di Ateneo dell'a.a. 2008/2009 (certificato mediante dichiarazione). (titolo trasmesso)
- **42.** Dichiarazione del Prof. Carlo Galli in qualità di Presidente del CAD in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nell'a.a. 2008/2009 in merito all'attività didattica e al precorso svolti dalla candidata. (titolo trasmesso)
- **43.** Seminario didattico tenuto nell'anno 2007 presso la Scuola di Specializzazione in Fisica Sanitaria dell'Università degli Studi di Torino (titolo dichiarato).
- **44.** Disposizione della Facoltà di SMFN per attività di tutorato (40 ore, a.a. 2006/2007) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica (CHIM/03) del Corso di Laurea in Chimica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza". (titolo trasmesso)
- **45.** Affidamento di incarico per attività di tutorato (40 ore, a.a. 2005/2006) nell'ambito dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica (CHIM/03) del Corso di Laurea in Chimica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza". (titolo trasmesso) VALUTABILE
- **46.** Partecipazione alle commissioni d'esame per il corso di Chimica Generale e Inorganica (dal 2009 al 2013) e per il corso di Chimica Organica (a.a. 2011/2012 e dal 2014 ad oggi) del Corso di Laurea in Scienze dell'Alimentazione e della Nutrizione Umana, Università Campus Bio-Medico di Roma (titolo dichiarato).
- **47.** Partecipazione dal 2014 ad oggi alle commissioni d'esame per i corsi di Chimica Generale e Inorganica con laboratorio e di Bioinorganica (Corso di Laurea in Chimica) e per il corso di Chimica Generale e Inorganica (Corso di Laurea in Biotecnologie agroindistriali) presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (titolo dichiarato).
- **48.** Partecipazione a commissioni di esami di Laurea Triennale e Magistrale in Chimica e Chimica Industriale presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (titolo dichiarato).

- **49.** Nomina a commissario esterno per la classe di concorso A013 Chimica e Tecnologie Chimiche (a.s. 2013/2014) per l'Esame di Stato di Istruzione Secondaria di II grado (titolo dichiarato).
- **50.** Contratto a tempo determinato di supplenza per la classe di concorso A059 Scienze Matematiche, Chimiche, Fisiche e Naturali nella Scuola Secondaria di I grado (a.s. 2013/2014). (titolo trasmesso)
- **51.** Contratto a tempo determinato di supplenza per la classe di concorso A059 Scienze Matematiche, Chimiche, Fisiche e Naturali nella Scuola Secondaria di I grado (a.s. 2013/2014). (titolo trasmesso)
- **52.** Contratto a tempo determinato di supplenza per la classe di concorso A013 Chimica e Tecnologie Chimiche nella Scuola Secondaria di II grado (a.s. 2013/2014). (titolo trasmesso)
- **53.** Contratto a tempo determinato di supplenza per la classe di concorso A060 Scienze naturali, Chimica, Geografia e Microbiologia nella Scuola Secondaria di II grado (a.s. 2014/2015). (titolo trasmesso)

APPARTENENZA A SOCIETA' E PREMI

- **54.** Attestato del premio per la Miglior Relazione Orale ottenuto nell'ambito del Secondo Convegno Giovani del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". (titolo trasmesso)
- 55. Dal 2006 Socio della Società Chimica Italiana Divisione di Chimica Inorganica
- 56.2012 Socio della Società Chimica Italiana Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici
- 57.2012 Socio della Società Italiana di Fotobiologia VALUTABILE
- **58.** Dal 2005 Componente dell'Unità di Ricerca di Roma "La Sapienza" del Consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli nei Sistemi Biologici (CIRCMSB)

ATTIVITA' DI PEER REVIEW

59. Il candidato dichiara di svolgere attività di referee per le seguenti riviste internazionali: Journal of Photochemistry and Photobiology, B: Biology; RSC Advances.

FINANZIAMENTI

- **60.** La candidata dichiara di aver partecipato come componente ad un finanziamento da bando PRIN
- **61.** La candidata dichiara di aver partecipato come come componente a 8 finanziamenti da bandi di Ateneo.

BREVETTI

62. Ercolani, C.; Monacelli, F.; Donzello, M. P.; **Viola E.** "Complessi mono- e pentametallici di tipo porfirazinico come fotosensibilizzatori in campo farmaceutico". Patent deposited in Italy, 29.10.07, n° RM2007A000571. (titolo trasmesso)

RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

63. La candidata presenta documentazione che certifica la partecipazione a 47 congressi nazionali ed internazionale con 21 comunicazioni orali e 24 poster

Valutazione sui titoli

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

La candidata ha conseguito la laurea in Chimica nel 2004 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (110/110 e lode) ed il titolo di Dottore di ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 presso la medesima università, con una tesi dal titolo "Synthesis, structure, redox behaviour and potential photosensitizing properties of novel mono- and multimetallic porphyrazines".

Nel 2018 ha conseguito l'abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per il Settore Concorsuale 03/B1.

Ha svolto con regolarità dal 2004 al 2015 attività di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza" in qualità di collaboratore a progetto, borsista "Post-Doc" e assegnista di ricerca, partecipando a numerose scuole nazionali. Infine ha anche ricoperto il ruolo di Ricercatore a Tempo Determinato di tipo A nel SSD CHIM/03 sempre presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza".

Ha svolto un'attività didattica molto ampia in ambito universitario e pienamente congruente con l'SSD CHIM/03 tra cui spicca la titolarità per tre Anni Accademici consecutivi del Corso di Chimica per il Corso di Laurea in Fisica e quella del corso di Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per la Laurea Triennale in Chimica (AA. 2016/2017). Ha partecipato a numerosi congressi nazionali ed internazionali e a progetti di ricerca universitari e PRIN (2007). Presenta un brevetto a copertura nazionale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è ottimo.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

La candidata ha conseguito la laurea in Chimica nel 2004 con la votazione di 110/110 e Lode (media degli esami esami 29.63/30 e 7 lodi) presso l'Università degli Studi di Roma, dove ha conseguito il titolo di Dottore di ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 (titolo della tesi di dottorato: "Synthesis, structure, redox behaviour and potential photosensitizing properties of novel monoand multimetallic porphyrazines"). Ha consequito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia per il Settore Concorsuale 03/B1 nella tornata 2017. Ha usufruito di diversi contratti, borse di studio e assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza", dove nel periodo 01/01/2016 – 31/12/2018 ha ricoperto il ruolo di RTDa nel SSD CHIM/03. Ha avuto numerosi incarichi per attività di orientamento e tutorato e assistenza alla didattica, tutti pienamente congruenti con il SSD CHIM/03. Inoltre, dal 2015/16 è stata titolare di 3 Corsi di Chimica CHIM/03. Ha prestato assistenza e supervisione a numerose tesi di laurea triennale, magistrale e di dottorato. Svolge attività di reviisore per le riviste Journal of Photochemistry and Photobiology, B: Biology e RSC Advances. La candidata elenca 47 partecipazioni a congressi e convegni, in particolare ha presentato 21 comunicazioni orali e 24 poster, e ha ricevuto un premio per la miglior relazione orale nell'ambito del Secondo Convegno Giovani del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma. Allega due lettere di presentazione e dichiara la deposizione di un brevetto.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è eccellente.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

La candidata ha conseguito la laurea in Chimica nel 2004 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con voto di 110/110 e lode e media degli esami esami 29.63/30 e 7 lodi), ed il titolo di Dottore di ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 presso la medesima università, con una tesi dal titolo "Synthesis, structure, redox behaviour and potential photosensitizing properties of novel mono- and multimetallic porphyrazines" (titolo trasmesso) i cui contenuti sono congruenti con il settore concorsuale 03/B1.

Nel 2018 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore Concorsuale 03/B1. Ha svolto con continuità attività di ricerca ricoprendo diversi ruoli presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza": collaboratore a progetto (2004-2008), borsista post-doc (2008, 5 mesi; 2010, 4 mesi), assegnista di ricerca (2009 e dal luglio 2011 a dicembre 2015). Dal 1 gennaio 2016 al 31 dicembre 2018 è stata ricercatrice a tempo indeterminato di tipo A nel SSD CHIM/03 sempre presso il Dipartimento di Chimica. Ha partecipato a numerose scuole nazionali che testimoniano un'attività di formazione continuativa. Ha svolto un'attività didattica molto ampia in ambito universitario e pienamente congruente con l'SSD CHIM/03. E' stata titolare negli anni a.a. 2015-2016/2016-2017/2017-2018 del Corso di Chimica per il corso di laurea in Fisica, e del corso di Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per la laurea triennale in Chimica (a.a. 2016/2017). Ha svolto attività didattica nell'ambito del precorso di Chimica Generale e di tutorato e assistenza in laboratorio. Ha partecipato a numerosi congressi nazionali ed internazionali. La candidata è membro della SCI nella divisione di Chimica Inorganica e componente dell'Unità di Ricerca di Roma "La Sapienza" del consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli nei Sistemi Biologici (CIRCMSB). Presenta un curriculum da cui si deduce

una intensa e continuativa attività di ricerca, testimoniata dalla attribuzione di borse di studio, contratti e assegni di ricerca. Ha partecipato a progetti di ricerca universitaria e PRIN (2007). Presenta un brevetto a copertura nazionale ed un premio nazionale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è ottimo.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Sono stati considerati i dati bibliometrici forniti dalla candidata e presi dalla banca dati SCOPUS.

- 1. Donzello M.P., VIOLA E., Cai X., Mannina L., Ercolani C., Kadish K.M. Tetra-2,3-pyrazinoporphyrazines with externally appended pyridine rings. 8. Central (ZnII, CulI, MgII(H2O), CdII) and exocyclic (PdII) metal ion binding in heteropentametallic complexes from tetrakis-2,3-[5,6-di(2-pyridyl)pyrazino]porphyrazine. INORGANIC CHEMISTRY, 2010, vol. 49, p. 2447-2456. Doi: 10.1021/ic902317h. (I.F. 4.325, numero citazioni= 25, Q1)
- 2. Manet I., Manoli F., Donzello M. P., VIOLA E., Andreano G., Masi A., Cellai L., Monti S. A cationic ZnII porphyrazine induces a stable parallel G-quadruplex conformation in human telomeric DNA. ORGANIC AND BIOMOLECULAR CHEMISTRY, 2011, vol. 9, p. 684-688. Doi: 10.1039/c0ob00598c. (I.F. 3.696, numero citazioni= 27, Q1).
- **3.** Donzello M.P., Vittori D., **VIOLA E.**, Manet I., Mannina L., Cellai L., Monti S., Ercolani C. Tetra-2,3-pyrazinoporphyrazines with externally appended pyridine rings. 9. Novel heterobimetallic macrocycles and related hydrosoluble hexacations as potentially active photo/chemotherapeutic anticancer agents. INORGANIC CHEMISTRY, 2011, vol. 50, p. 7391-7402. Doi: 10.1021/ic200498s. (I.F. 4.601, numero citazioni= 31, Q1).
- **4.** De Mori G., Fu Z., **VIOLA E.**, Cai X., Ercolani C., Donzello M.P., Kadish K.M. Tetra-2,3-pyrazinoporphyrazines with externally appended thienyl rings: synthesis, UV-visible spectra, electrochemical behavior and photoactivity for the generation of singlet oxygen. INORGANIC CHEMISTRY, 2011, vol. 50, p. 8225-8237. Doi: 10.1021/ic2007556. (I.F. 4.601, numero citazioni= 22, Q1).
- 5. Donzello M.P., De Mori G., VIOLA E., Ercolani C., Bodo E., Mannina L., Capitani D., Rizzoli C., Gontrani L., Aquilanti G., Kadish K. M., D'Angelo P. Structural flexibility and role of vicinal 2- thienyl rings in 2,3-dicyano-5,6-di(2-thienyl)-1,4-pyrazine, [(CN)2Th2Pyz], its Palladium(II) complex [(CN)2Th2Pyz(PdCl2)2], and the related pentametallic pyrazinoporphyrazines [(PdCl2)4Th8TPyzPzM] (M = MgII(H2O), ZnII). INORGANIC CHEMISTRY, 2011, vol. 50, p. 12116-12125. Doi: 10.1021/ic201678p. (I.F. 4.601, numero citazioni= 7, Q1).
- 6. Donzello M.P., VIOLA E.*, Giustini M., Ercolani C., Monacelli F. Tetrakis(thiadiazole)porphyrazines. 8. Singlet oxygen production, fluorescence response and liposomal incorporation of tetrakis(thiadiazole)porphyrazine macrocycles [TTDPzM] (M= MgII(H2O), ZnII, AlIIICI, GaIIICI, CdII, CuII, 2HI). DALTON TRANSACTIONS, 2012, vol. 41, p. 6112-6121.Doi: 10.1039/c2dt12381a. (I.F. 3.806, numero citazioni= 23, Q1).
- 7. Donzello M.P., VIOLA E., Ercolani C., Fu Z., Futur D., Kadish K.M. Tetra-2,3-pyrazinoporphyrazines with externally appended pyridine rings. 12. New heteropentanuclear complexes carrying four exocyclic cis-platin-like functionalities as potential bimodal (PDT/Cisplatin) anticancer agents. INORGANIC CHEMISTRY, 2012, vol. 51, p. 12548-12559. Doi: 10.1021/ic301989a. (I.F. 4.593, numero citazioni= 28, Q1).
- 8. Manet I., Manoli F., Donzello M.P., VIOLA E., Masi A., Andreano G., Ricciardi G., Rosa A., Cellai L., Ercolani C., Monti S. Pyrazinoporphyrazines with externally appended pyridine rings. 13. Structure, Uv-visible spectral features, and noncovalent interaction with DNA of a positively charged binuclear (Zn(II)/Pt(II)) macrocycle with multimodal anticancer potentialities. INORGANIC CHEMISTRY, 2013, vol. 52, p. 321-328. Doi: 10.1021/ic3020755. ([2013 Impact Factor: 4.794 Citazioni: 24 (Scopus)], Q1).
- **9.** Donzello M.P., De Mori G., **VIOLA E.**, Ercolani C., Ricciardi G., Rosa A. Tetra-2,3-pyrazinoporphyrazines with externally appended pyridine rings. 15. Effects of the pyridyl substituents and fused exocyclic rings on the UV-visible spectroscopic properties of Mg(II)-porphyrazines: a combined experimental and DFT/TDDFT study. INORGANIC

- CHEMISTRY, 2014, vol. 53, p. 8009-8019. Doi: 10.1021/ic500880m. (I.F. 4.762, numero citazioni= 13, Q1).
- **10.** Donzello M.P., De Mori G., **VIOLA E.***, Ercolani C., Ricciardi G. Zinc(II) complexes of tetrakis-(6,7-quinoxalino)porphyrazine bearing externally appended 2-pyridyl rings: synthesis, UVvisible spectral behavior and photoactivity for singlet oxygen generation. JOURNAL OF PORPHYRINS AND PHTHALOCYANINES, 2014, vol. 18, p. 1042-1050. Doi: 10.1142/S1088424614500874. (I.F. 1.397, numero citazioni= 5, Q2).
- **11.** Pietrangeli D., Rosa A., Pepe A., Altieri S., Bortolussi S., Postuma I., Protti N., Ferrari C., Consolino L., Clerici A.M., **VIOLA E.**, Donzello M.P., Ricciardi G. Water-soluble carboranylphthalocyanines for BNCT. Synthesis, characterization, and in vitro tests of the Zn(II)-nidocarboranyl- hexylthiophthalocyanine. DALTON TRANSACTIONS, 2015, vol. 44, p. 11021-11028. Doi: 10.1039/C5DT00394F. (I.F. 4.177, numero citazioni= 9, Q1).
- **12. VIOLA E.*,** Donzello M.P., Scicione F., Shah K., Ercolani C., Trigiante G. Tetra-2,3-pyrazinoporphyrazines with externally appended pyridine rings. 17. Photosensitizing properties and cellular effects of ZnII octacationic and ZnII/PtII hexacationic macrocycles in aqueous media: Perspectives of multimodal anticancer potentialities. JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY B-BIOLOGY, 2017, vol. 169, p. 101-109. Doi: 10.1016/j.jphotobiol.2017.03.005. (I.F. 3.165, numero citazioni= 3, Q2).
- **13.** Donzello M.P., Gigante F., Sciscione F., **VIOLA E.***, Kadish K.M. Tetra-2,3-pyrazinoporphyrazines with externally appended pyridine rings. 18. Physicochemical properties and photochemical behavior of new uncharged water soluble low-symmetry macrocycles [{Pd(OAc)2}3(PtCl2)LM] (M = MgII(H2O), ZnII, PdII). JOURNAL OF PORPHYRINS AND PHTHALOCYANINES, 2017, vol. 21, p. 334-344. Doi: 10.1142/S1088424617500250. (I.F. 1.217, numero citazioni= 1, Q2).
- **14.** Sciscione F., Cong L., Donzello M.P., **VIOLA E.**, Ercolani C., Kadish K.M. Octakis(2-pyridyl)porphyrazine and Its Neutral Metal Derivatives: UV-Visible Spectral, Electrochemical, and Photoactivity Studies. INORGANIC CHEMISTRY, 2017, vol. 56, p. 5813-5826. Doi: 10.1021/acs.inorgchem.7b00418. (I.F. 4.700, numero citazioni= 2, Q1).
- **15.** Floris B., Donzello M. P., Ercolani C., **VIOLA E.*** The chameleon-like coordinating ability of 2,3- di(pyridyl)pyrazine-type ligands. COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS, 2017, vol. 347, p. 115-140. Doi: 10.1016/j.ccr.2017.06.005. (I.F. 14.499, numero citazioni= 3, Q1).
- **16.** Sciscione F., Manoli F., **VIOLA E**., Wankar J., Ercolani C., Donzello M.P., Manet I. Photoactivity of New Octacationic Magnesium(II) and Zinc(II) Porphyrazines in a Water Solution and GQuadruplex Binding Ability of Differently Sized Zinc(II) Porphyrazines. INORGANIC CHEMISTRY, 2017, vol. 56, p. 12795-12808. Doi:10.1021/acs.inorgchem.7b01557. (I.F. 4.700, numero citazioni= 1, Q1). (*) = autore di riferimento

Valutazione delle singole pubblicazioni

Criteri di valutazione:

- **A**. originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);
- **B**. congruenza di ciascuna pubblicazione con le tematiche del Settore Concorsuale 03/B1 Settore Scientifico Disciplinare CHIM/03 del bando (piena, parziale scarsa);
- **C**. rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (eccellente/ottimo/buono/sufficiente/scarso);
- **D**. apporto individuale del candidato (primario/significativo/secondario/scarso); **giudizio complessivo (A+B+C+D)** (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

Pubblicazione N. 1:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A = eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 10:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 11:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 13:

A = eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 14:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A = eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

Pubblicazione N. 1:

A: eccellente: B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 3:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 4:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8.

A: eccellente; B= piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 10:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 11:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 14:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO**.

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata ha pubblicato il primo articolo scientifico nel 2005. Dichiara di aver pubblicato n. 31 lavori, corrispondenti ad una media di circa 2.4 lavori per anno, di avere un valore totale di Impact Factor di 109.848 corrispondente ad un valore medio per pubblicazione di 3.543, calcolati in base all'anno di pubblicazione, e di aver ottenuto un totale di 397 citazioni (numero medio di citazioni per pubblicazione 12.81) che le consentono di avere un H-index di 13.

Dal settembre 2012 al gennaio 2017 la candidata ha usufruito di due periodi di astensione dal lavoro per congedo per maternità e di tre brevi periodi di astensione dal lavoro per congedo parentale, per un totale di circa 15 mesi. Il numero dei lavori per anno effettivo viene quindi corretto al valore di circa 2.6.

Valutazione sulla produzione complessiva (eccellente/ottimo/buono/discreto/sufficiente)

COMMISSARIO 1: Prof. Vito Lippolis

L'attività di ricerca della candidata è stata indirizzata allo sviluppo e studio per quanto concerne le relazioni struttura-proprietà di complessi mono- e multimetallici di leganti macrociclici di tipo porfirazinico per applicazioni innovative in campo biomedico e farmacologico. La produzione scientifica, sviluppatasi con continuità temporale denota originalità dei risultati, rigore metodologico della ricerca e valenza scientifica molto buona consistentemente con gli indicatori bibliometrici. Le

16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione sono ad ampia diffusione internazionale e quasi tutte nel primo quartile, congruenti con il SSD CHIM/03 e anche con l'attività di ricerca prevista dalla presente procedura. L'apporto individuale della candidata alle pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, risultando la candidata autore di riferimento in n. 5 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva della candidata è ottimo.

COMMISSARIO 2: Prof.ssa Adriana Bigi

L'attività di ricerca della candidata, che si avvale di collaborazioni nazionali e internazionali, è incentrata su nuovi macrocicli di tipo porfirazinico, mono- e multimetallici con potenzialità applicative in ambito biomedico, come farmaci antitumorali dall'azione mono- o multimodale in foto/chemioterapie. Tale attività prevede la progettazione, la sintesi e la caratterizzazione strutturale e chimico-fisica dei composti in oggetto, al fine di determinarne le relazioni tra proprietà e struttura.

Le 16 pubblicazioni presentate, tutte completamente pertinenti al settore concorsuale 03/B1 e pienamente congruenti con il settore scientifico disciplinare CHIM/03, sono su riviste internazionali ad ampia diffusione internazionale (quasi tutte nel primo quartile (Q1)). La candidata è autore di riferimento in n. 5 delle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale e internazionale, e il suo apporto individuale è chiaramente enucleabile e significativo,

La candidata ha pubblicato il primo articolo nel 2005: da allora la produzione scientifica, molto buona e pienamente congruente con il SSD CHIM/03 è proseguita con continuità raggiungendo livelli consistenti per numerosità, originalità e rilevanza scientifica.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva della candidata è molto buono.

COMMISSARIO 3: Prof. Stefano Stranges

L'attività di ricerca della candidata è riconducibile essenzialmente al settore della chimica bioinorganica, e riguarda principalmente la sintesi, la caratterizzazione strutturale chimico-fisica generale e lo studio delle proprietà fotofisiche e fotochimiche di nuovi macrocicli ti tipo porfirazinico, aventi innovative caratteristiche strutturali per potenziali applicazioni nel'ambito della terapia fotodinamica e della terapia anticancro bi- e multimodale. L'attività, come testimoniato dai progetti di ricerca e dalle pubblicazioni, si avvale di collaborazioni nazionali e internazionali.

La produzione scientifica, numericamente consistente, è collocata su riviste di ottima qualità e ad ampia diffusione internazionale del primo quartile (Q1). Le pubblicazioni presentate sono tutte completamente pertinenti al settore concorsuale 03/B1 e pienamente congruenti con il settore scientifico disciplinare CHIM/03. La consistenza complessiva della produzione scientifica è molto buona e continua nel tempo, congruente con il SSD CHIM/03 e con l'attività di ricerca prevista dalla presente procedura e risulta caratterizzata da elementi di originalità e rilevanza scientifica. L'apporto individuale della candidata alle 16 pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, risultando la candidata autore di riferimento in n. 5 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva della candidata è ottimo.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Valutazione sui titoli

La candidata ha conseguito la laurea in Chimica nel 2004 con la votazione di 110/110 e Lode (media degli esami esami 29.63/30 e 7 lodi) presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", dove ha conseguito il titolo di Dottore di ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 con una tesi dal titolo "Synthesis, structure, redox behaviour and potential photosensitizing properties of novel mono- and multimetallic porphyrazines".

Nel 2018 ha conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di II Fascia di cui all'articolo 16 della legge n. 240 (2010) per il Settore Concorsuale 03/B1.

Ha svolto con regolarità dal 2004 al 2015 attività di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza" in qualità di collaboratore a progetto, borsista "Post-Doc" e

assegnista di ricerca, partecipando a numerose scuole nazionali. Infine dal 1 gennaio 2016 al 31 dicembre 2018 ha anche ricoperto il ruolo di Ricercatore a Tempo Determinato di tipo A nel SSD CHIM/03 sempre presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza".

Ha svolto un'attività didattica molto ampia in ambito universitario e pienamente congruente con l'SSD CHIM/03 tra cui spicca la titolarità per tre Anni Accademici consecutivi (a.a. 2015-2016/2016-2017/2017-2018) del Corso di Chimica per il Corso di Laurea in Fisica e quella del corso di Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica con Laboratorio per la Laurea Triennale in Chimica (AA. 2016/2017).

Ha prestato assistenza e supervisione a numerose tesi di laurea triennale, magistrale e di dottorato. Svolge attività di reviewer per le riviste Journal of Photochemistry and Photobiology, B: Biology e RSC Advances. La candidata elenca 47 partecipazioni a congressi e convegni, in particolare ha presentato 21 comunicazioni orali e 24 poster, e ha ricevuto un premio per la miglior relazione orale nell'ambito del Secondo Convegno Giovani del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma. Allega due lettere di presentazione. La candidata è membro della SCI nella divisione di Chimica Inorganica e componente dell'Unità di Ricerca di Roma "La Sapienza" del consorzio Interuniversitario di Ricerca in Chimica dei Metalli nei Sistemi Biologici (CIRCMSB). Ha partecipato a progetti di ricerca universitaria e PRIN (2007). Presenta un brevetto a copertura nazionale.

Complessivamente il giudizio sui titoli presentati dalla candidata è eccellente.

Valutazione sulle singole pubblicazioni presentate

Pubblicazione N. 1:

A: eccellente: B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 2:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 3:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 4:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 5:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 6

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 7:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 8.

A: eccellente; B= piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 9:

A: eccellente; B = piena; C = eccellente; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE.**

Pubblicazione N. 10:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 11:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 12:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 13:

A: eccellente; B = piena; C = buono; D = primario; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 14:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Pubblicazione N. 15:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = primario; giudizio complessivo = **ECCELLENTE**.

Pubblicazione N. 16:

A: eccellente; B = piena; C = ottimo; D = significativo; giudizio complessivo = **OTTIMO.**

Valutazione sulla produzione complessiva

L'attività di ricerca della candidata, che si avvale di collaborazioni nazionali e internazionali, è stata indirizzata allo sviluppo e studio per quanto concerne le relazioni struttura-proprietà di complessi mono- e multimetallici di leganti macrociclici di tipo porfirazinico per applicazioni innovative in campo biomedico e farmacologico.

La produzione scientifica, sviluppatasi con continuità temporale denota originalità dei risultati, rigore metodologico della ricerca e valenza scientifica molto buona consistentemente con gli indicatori bibliometrici. Le 16 pubblicazioni presentate ai fini della valutazione sono ad ampia diffusione internazionale e quasi tutte nel primo quartile, pienamente congruenti con il SSD CHIM/03 e anche con l'attività di ricerca prevista dalla presente procedura. L'apporto individuale della candidata alle pubblicazioni presentate, tutte in collaborazione in ambito nazionale ed internazionale, risulta chiaramente enucleabile e significativo, risultando la candidata autore di riferimento in n. 5 pubblicazioni.

Il giudizio sulla produzione scientifica complessiva della candidata è ottimo.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 11:00.
Letto, confermato e sottoscritto.
PER LA COMMISSIONE
Prof. Stefano STRANGES