



PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 03-B1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM03 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1699 DEL 28.07.2021.

VERBALE N. 2 – SEDUTA VALUTAZIONE TITOLI

Il 12 novembre 2021 si è riunita alle ore 15:00, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Google Meet, meet.google.com/yzn-wuo-tdr) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-B1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/03 – CHIMICA GENERALE ED INORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 79 del 05.10.2021 e composta da:

- Prof.ssa Maria Elisa Crestoni – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", mariaelisa.crestoni@uniroma1.it;
- Prof. Nazzareno Re – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi "G. d'Annunzio" Chieti-Pescara, nre@unich.it;
- Prof. Mauro Ravera – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica dell'Università del Piemonte Orientale "Amedeo Avogadro", mauro.ravera@uniupo.it.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:00.

Il Presidente informa la Commissione di aver acquisito dal responsabile del procedimento l'elenco dei candidati ammessi con riserva alla procedura selettiva e la documentazione in formato elettronico trasmessa dagli stessi, ai sensi dell'art.3 del bando di concorso.

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



I candidati da valutare ai fini della procedura selettiva risultano sono n. 3 (tre) e precisamente:

1. Davide Corinti
2. Vadde Ramu
3. Raju Gajjela

La Commissione procede quindi alla valutazione preliminare dei candidati con motivato giudizio sui titoli, sul curriculum e sulla produzione scientifica, secondo i criteri definiti dal D.M. n. 243/2011 e fissati in dettaglio nell'Allegato N.1 del verbale della seduta del 5.11.2021.

L'elenco dei titoli e la valutazione preliminare di ciascun candidato vengono riportati in dettaglio nell'Allegato N.2, che costituisce parte integrante del presente verbale.

Sulla base della documentazione pervenuta da parte dei candidati è ammesso a sostenere il colloquio pubblico il candidato DAVIDE CORINTI.

Il colloquio, salvo rinuncia scritta al preavviso di 20 (venti) giorni, si terrà il giorno 3 dicembre 2021 alle ore 10 avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Google Meet: meet.google.com/vof-dgsg-pff) di lavoro collegiale.

In caso di rinuncia scritta, il colloquio è fissato per il giorno 15 novembre alle ore 15:30 in modalità telematica (collegamento via Google Meet: meet.google.com/ugg-cnew-xsy).

La Commissione termina i propri lavori alle ore 16.30.

Letto, confermato e sottoscritto.

Roma, 12 novembre 2021

La Commissione

Prof. Nazzareno Re- Presidente

Prof. Mauro Ravera – Componente

Prof.ssa Maria Elisa Crestoni- Segretario



ALLEGATO N.2

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCURSALE 03-B1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM03 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1699 DEL 28.07.2021.

Il 12 novembre 2021 si è riunita alle ore 15:00, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Google Meet, meet.google.com/yzn-wuo-tdr) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-B1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/03 – CHIMICA GENERALE ED INORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 79 del 05.10.2021 e composta da:

- Prof.ssa Maria Elisa Crestoni – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", mariaelisa.crestoni@uniroma1.it;
- Prof. Nazzareno Re – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi "G. d'Annunzio" Chieti-Pescara, nre@unich.it;
- Prof. Mauro Ravera – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica dell'Università del Piemonte Orientale "Amedeo Avogadro", mauro.ravera@uniupo.it.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:00.

La Commissione, accertato che i criteri generali fissati nella precedente riunione sono stati resi pubblici per almeno sette giorni, inizia la verifica dei nomi dei Candidati, tenendo conto delle domande pervenute.

La Commissione, presa visione dell'elenco dei Candidati alla presente procedura, prende atto che i candidati da valutare ai fini della procedura selettiva sono n.3 (tre) e precisamente:

1. Davide Corinti
2. Vadde Ramu
3. Raju Gajjela



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

Sulla base della documentazione esaminata, la commissione decide all'unanimità di non ammettere alla presente procedura selettiva di reclutamento n. 2 candidati:

. VADDE RAMU

. RAJU GAJJELA

in quanto la documentazione trasmessa per via telematica al Direttore del Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" all'indirizzo di posta elettronica dipartimentoctf@cert.uniroma1.it **non è conforme** a quanto prescritto all'articolo n. 3 dal bando di ricerca **D.D. N. 1699 DEL 28.07.2021**.

La commissione procede pertanto all'analisi della documentazione trasmessa dal Candidato DAVIDE CORINTI.

La Commissione verifica che i titoli allegati alla domanda siano stati certificati conformemente al bando.

Procede poi ad elencare analiticamente i titoli e le pubblicazioni trasmesse dal Candidato.

La Commissione elenca i titoli e le pubblicazioni valutabili (Allegato N.2/A). Vengono esaminati i titoli e le pubblicazioni del Candidato DAVIDE CORINTI.

La Commissione redige, quindi, una relazione contenente il profilo curriculare del Candidato con una breve valutazione collegiale del profilo, anche in relazione alla linea di ricerca e ad eventuali altri requisiti stabiliti dal Bando, una valutazione della produttività scientifica ed una valutazione bibliometrica, in accordo a quanto riportato nel Verbale n. 1.

La Commissione inizia la valutazione dei titoli, delle pubblicazioni e della tesi di dottorato del Candidato.

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

In particolare la Commissione rileva che sia la Prof.ssa M. Elisa Crestoni che il Prof. Nazzareno Re hanno alcuni lavori in comune con il candidato DAVIDE CORINTI.

Dopo attenta analisi comparata di tali lavori, la Commissione rileva che i contributi scientifici del candidato sono enucleabili e distinguibili e pertanto è possibile valutare l'apporto individuale del candidato.

Candidato: **DAVIDE CORINTI**



Da parte di ciascun Commissario si procede all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione dei singoli giudizi da parte degli stessi commissari. Ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale e la Commissione quello collegiale. I giudizi dei singoli Commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (Allegato 2/B).

La Commissione, dopo aver effettuato una discussione collegiale sul profilo e sulla produzione scientifica del Candidato, ammette il Dott. Davide Corinti alla fase successiva della procedura.

Il Presidente invita il Responsabile del procedimento a comunicare al Dott. Davide Corinti la data di convocazione per lo svolgimento del colloquio in forma seminariale previsto dal bando.

La Commissione viene sciolta alle ore 16.30 e si riconvoca per il giorno 3 dicembre 2021 alle ore 10 avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Google Meet: meet.google.com/vof-dgsg-pff).

In caso di rinuncia scritta, il colloquio è fissato per il giorno 15 novembre alle ore 15:30 in modalità telematica (collegamento via Google Meet: meet.google.com/ugg-cnew-xsy).

Letto approvato e sottoscritto seduta stante.

Roma, 12 novembre 2021

La Commissione

Prof. Nazzareno Re- Presidente

Prof. Mauro Ravera – Componente

Prof.ssa Maria Elisa Crestoni- Segretario



ALLEGATO N.2/A

TITOLI E PUBBLICAZIONI VALUTABILI

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 03-B1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM03 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1699 DEL 28.07.2021.

Il 12 novembre 2021 si è riunita alle ore 15:00, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Google Meet, meet.google.com/yza-nwuo-tdr) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-B1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/03 – CHIMICA GENERALE ED INORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 79 del 05.10.2021 e composta da:

- Prof.ssa Maria Elisa Crestoni – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", mariaelisa.crestoni@uniroma1.it;
- Prof. Nazzareno Re – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi "G. d'Annunzio" Chieti-Pescara, nre@unich.it;
- Prof. Mauro Ravera – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica dell'Università del Piemonte Orientale "Amedeo Avogadro", mauro.ravera@uniupo.it.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:00.

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

CANDIDATO: DAVIDE CORINTI

VERIFICA TITOLI VALUTABILI

1. DOTTORATO DI RICERCA (titolo Doctor Europaeus) in Scienze Farmaceutiche conseguito il 21/12/2018 con votazione ottimo con Lode



- presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Tesi originale allegata). E' VALUTABILE
2. Lettera di referenze della Prof.ssa Perdita Barran attestante le competenze acquisite nel periodo di 3 mesi passato nei laboratori dell'Università di Manchester (01/03/2017 – 31/05/2017). E' VALUTABILE
 3. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 02/01/2015 al 30/10/2015. E' VALUTABILE
 4. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2019 al 30/06/2020. E' VALUTABILE
 5. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2020. E' VALUTABILE
 6. Titolarità di Borsa di studio per Attività di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 03/12/2018 al 30/04/2019. E' VALUTABILE
 7. Titolarità di assegno per attività di tutorato per l'insegnamento di Chimica del corso di laurea triennale in Ingegneria Energetica presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" per l'anno accademico 2019/2020. E' VALUTABILE
 8. Incarico di docenza per l'Insegnamento "Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica" del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche di Sapienza – Università di Roma per gli anni accademici 2019/2020 e 2020/2021. E' VALUTABILE
 9. Incarico di docenza per l'Insegnamento di "Chimica Bioinorganica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila per gli anni accademici: 2018/2019, 2019/2020 e 2020/2021. E' VALUTABILE
 10. Partecipazione all'EU FT-ICR MS Short Course 4 presso Warwick, UK. E' VALUTABILE
 11. Partecipazione in qualità di membro del comitato organizzatore all'EU FT-ICR MS Short Course 3 tenutosi a Roma. E' VALUTABILE
 12. Partecipazione alla Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica per Dottorandi 2019 presso la sede centrale del CNR di Roma (RM). E' VALUTABILE
 13. Partecipazione all'EU FT-ICR MS End User School 1 presso Joensuu, Finlandia. E' VALUTABILE



14. Partecipazione alla CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques tenutasi a Trieste (TS). E' VALUTABILE
15. Partecipazione al XX Corso di Spettrometria di Massa presso la Certosa di Pontignano (SI). E' VALUTABILE
16. Partecipazione alla I Scuola di Spettrometria di Massa in Ambito Farmaceutico presso Angelini S.P.A., S. Palomba (RM). E' VALUTABILE
17. Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 da parte della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana. E' VALUTABILE
18. Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018 per l'articolo "Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy". E' VALUTABILE
19. Lake Louise Student Travel Awards a Novembre 2017 per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada. E' VALUTABILE
20. Best Poster Prize al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa tenutosi a Roma (RM). E' VALUTABILE
21. Best Poster Prize al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino. E' VALUTABILE
22. Partecipazione all'ACS Spring 2021, congresso in remoto, 5-16 aprile 2021. Presentazione orale dal titolo: "Cisplatin ligand substitution by aminoacids: structure and reactivity of isolated encounter complexes". E' VALUTABILE
23. Inorganic Reaction Mechanisms Group meeting tenutosi in remoto, 7 luglio 2020. Presentazione orale dal titolo: "Reductive dissociation of bare Pt(IV) prodrugs produces elusive open-shell Pt(III) species". E' VALUTABILE
24. ASMS Conference 2020 Reboot tenutasi in remoto, 1-12 giugno 2020. Presentazione di un poster dal titolo: "Dissociation of mass-isolated encounter complexes of platinum(IV) prodrugs and ascorbic acid elucidates details on their bioactivation". E' VALUTABILE
25. XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica presso Bari (BA), 9-12 Settembre 2019. Presentazione orale dal titolo: "Reaching a new level of understanding of the bioinorganic chemistry of Pt drugs using MS-based techniques". E' VALUTABILE
26. XXII International Mass Spectrometry Conference tenutasi a Firenze (FI), 26-31 agosto 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Elusive monofunctional adducts of cisplatin with natural aminoacids revealed by IRMPD spectroscopy and photofragmentation kinetics". E' VALUTABILE



27. XXIV IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC24) presso Faro, Portogallo, 1-6 luglio 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Structural insights into non-covalent halide adducts with tyrosine and 3-nitrotyrosine using ion-spectroscopy". E' VALUTABILE
28. XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada, 29 novembre– 2 dicembre 2017. Presentazione orale dal titolo: "MS coupled with IRMPD spectroscopy and fixed-wavelength kinetics to disclose isomeric mixtures of antitumor PtII-complexes with amino acids". E' VALUTABILE
29. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana tenutosi a Paestum (SA), 10-14 settembre 2017. Presentazione di un poster dal titolo: "Structural characterization and reactivity of bare cis- and transplatin hydrolysis products". E' VALUTABILE
30. XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa a Roma (RM), 6-8 settembre 2016. Presentazione orale dal titolo: "Exploring ligand substitution mechanisms at the molecular level with IRMPD/MS: the case of cisplatin" E' VALUTABILE
e presentazione poster intitolato: "Distinction between Cyanidin 3-O-glucoside and Cyanidin 3-O-galactoside by mass spectrometry combined with IRMPD spectroscopy". E' VALUTABILE
31. 1st NatMedDay workshop presso Aboca, SanSepolcro (AR) 22-23 settembre 2015. Presentazione di un poster intitolato: "Probing Biomolecules of Nutritional Interest: IRMPD Spectroscopy of Bare Protonated Pantothenic Acid". E' VALUTABILE
32. Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino (MC), 9-12 settembre 2015. Presentazione di un poster dal titolo: "Cisplatin reactions with model biological ligands monitored by IR multiphoton dissociation spectroscopy". E' VALUTABILE
33. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2016. E' VALUTABILE
34. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1800€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2017. E' VALUTABILE
35. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2018. E' VALUTABILE
36. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 2 (2000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2020. E' VALUTABILE
37. Assegnazione di BeamTime da parte dell'Advisory Committee del FELIX laboratory per lo svolgimento del progetto "Discrimination of isomeric flavanones based on IR ion spectroscopy" (FELIX-2021-01-11). E' VALUTABILE



VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1. D. Corinti, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Binding to Biological Ligands Revealed at the Encounter Complex Level by IR Action Spectroscopy, *Chem. - A Eur. J.* 22 (2016) 3794–3803. E' VALUTABILE
2. D. Corinti, A. De Petris, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Primary Complex with l-Histidine Target Revealed by IR Multiple Photon Dissociation (IRMPD) Spectroscopy, *ChemPhysChem.* 18 (2017) 318–325. E' VALUTABILE
3. R. Paciotti, D. Corinti, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C. Coletti, N. Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. Elisa Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (2017) 26697–26707. E' VALUTABILE
4. D. Corinti, C. Coletti, N. Re, S. Piccirillo, M. Giampà, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Hydrolysis of cis- and transplatin: structure and reactivity of the aqua complexes in a solvent free environment, *RSC Adv.* 7 (2017) 15877–15884. E' VALUTABILE
5. D. Corinti, B. Gregori, L. Guidoni, D. Scuderi, T.B. McMahon, B. Chiavarino, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Complexation of halide ions to tyrosine: role of non-covalent interactions evidenced by IRMPD spectroscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (2018) 4429–4441. E' VALUTABILE
6. D. Corinti, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maître, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Shortlived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy, *Int. J. Mass Spectrom.* 435 (2019) 7–17. E' VALUTABILE
7. A. Theisen, R. Black, D. Corinti, J.M. Brown, B. Bellina, P.E. Barran, Initial Protein Unfolding Events in Ubiquitin, Cytochrome c and Myoglobin Are Revealed with the Use of 213 nm UVPD Coupled to IM-MS, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 30 (2019) 24–33. E' VALUTABILE
8. D. Corinti, A. Maccelli, B. Chiavarino, P. Maitre, D. Scuderi, E. Bodo, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Vibrational signatures of curcumin's chelation in copper(II) complexes: An appraisal by IRMPD spectroscopy, *J. Chem. Phys.* 150 (2019) 165101. E' VALUTABILE
9. P. Maitre, D. Scuderi, D. Corinti, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Applications of Infrared Multiple Photon Dissociation (IRMPD)



- to the Detection of Posttranslational Modifications, Chem. Rev. 120 (2020) 3261–3295. E' VALUTABILE
10. D. Corinti, M.E. Crestoni, S. Fornarini, E. Dabbish, E. Sicilia, E. Gabano, E. Perin, D. Osella, A multimethodological inquiry of the behavior of cisplatin-based Pt(IV) derivatives in the presence of bioreductants with a focus on the isolated encounter complexes, JBIC J. Biol. Inorg. Chem. 25 (2020) 655– 670. E' VALUTABILE
11. D. Corinti, G. Frison, B. Chiavarino, E. Gabano, D. Osella, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Can an Elusive Platinum(III) Oxidation State be Exposed in an Isolated Complex?, Angew. Chemie Int. Ed. 59 (2020) 15595–15598. E' VALUTABILE
12. B. Chiavarino, R.K. Sinha, M.E. Crestoni, D. Corinti, A. Filippi, C. Fraschetti, D. Scuderi, P. Maitre, S. Fornarini, Binding Motifs in the Naked Complexes of Target Amino Acids with an Excerpt of Antitumor Active Biomolecule: An Ion Vibrational Spectroscopy Assay, Chem. – A Eur. J. 27 (2021) 2348–2360. E' VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione complessiva del Candidato DAVIDE CORINTI consiste in 25 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS, delle quali 12 selezionate per la presente selezione.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 16:30.

Letto, approvato e sottoscritto.

Roma, 12 novembre 2021

La Commissione

Prof. Nazzareno Re- Presidente

Prof. Mauro Ravera – Componente

Prof.ssa Maria Elisa Crestoni- Segretario

ALLEGATO 2/B



GIUDIZI INDIVIDUALI E COLLEGIALI

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCURSALE 03-B1 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM03 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA E TECNOLOGIE DEL FARMACO DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N. 1699 DEL 28.07.2021.

Il 12 novembre 2021 si è riunita alle ore 15:00, avvalendosi di strumenti telematici (collegamento via Google Meet, meet.google.com/yza-nwuo-tdr) di lavoro collegiale, la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 03-B1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/03 – CHIMICA GENERALE ED INORGANICA - presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 79 del 05.10.2021 e composta da:

- Prof.ssa Maria Elisa Crestoni – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", mariaelisa.crestoni@uniroma1.it;
- Prof. Nazzareno Re – Professore Ordinario presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi "G. d'Annunzio" Chieti-Pescara, nre@unich.it;
- Prof. Mauro Ravera – Professore Associato presso il Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica dell'Università del Piemonte Orientale "Amedeo Avogadro", mauro.ravera@uniupo.it.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 15:00.

La Commissione prosegue i propri lavori e procede ad elaborare la valutazione individuale e collegiale dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati.

CANDIDATO: DAVIDE CORINTI

Commissario 1
Prof.ssa Maria Elisa Crestoni

TITOLI



1. DOTTORATO DI RICERCA (titolo Doctor Europaeus) in Scienze Farmaceutiche conseguito il 21/12/2018 con votazione ottimo con Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Tesi originale allegata).
2. Lettera di referenze della Prof.ssa Perdita Barran attestante le competenze acquisite nel periodo di 3 mesi passato nei laboratori dell'Università di Manchester (01/03/2017 – 31/05/2017).
3. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 02/01/2015 al 30/10/2015.
4. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2019 al 30/06/2020.
5. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2020.
6. Titolarità di Borsa di studio per Attività di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 03/12/2018 al 30/04/2019.
7. Titolarità di assegno per attività di tutorato per l'insegnamento di Chimica del corso di laurea triennale in Ingegneria Energetica presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" per l'anno accademico 2019/2020.
8. Incarico di docenza per l'Insegnamento "Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica" del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche di Sapienza – Università di Roma per gli anni accademici 2019/2020 e 2020/2021.
9. Incarico di docenza per l'Insegnamento di "Chimica Bioinorganica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila per gli anni accademici: 2018/2019, 2019/2020 e 2020/2021.
10. Partecipazione all'EU FT-ICR MS Short Course 4 presso Warwick, UK.
11. Partecipazione in qualità di membro del comitato organizzatore all'EU FT-ICR MS Short Course 3 tenutosi a Roma.
12. Partecipazione alla Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica per Dottorandi 2019 presso la sede centrale del CNR di Roma (RM).
13. Partecipazione all'EU FT-ICR MS End User School 1 presso Joensuu, Finlandia.
14. Partecipazione alla CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques tenutasi a Trieste (TS).



15. Partecipazione al XX Corso di Spettrometria di Massa presso la Certosa di Pontignano (SI).
16. Partecipazione alla I Scuola di Spettrometria di Massa in Ambito Farmaceutico presso Angelini S.P.A., S. Palomba (RM).
17. Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 da parte della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana.
18. Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018 per l'articolo "Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy".
19. Lake Louise Student Travel Awards a Novembre 2017 per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada.
20. Best Poster Prize al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa tenutosi a Roma (RM).
21. Best Poster Prize al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino.
22. Partecipazione all'ACS Spring 2021, congresso in remoto, 5-16 aprile 2021. Presentazione orale dal titolo: "Cisplatin ligand substitution by aminoacids: structure and reactivity of isolated encounter complexes".
23. Inorganic Reaction Mechanisms Group meeting tenutosi in remoto, 7 luglio 2020. Presentazione orale dal titolo: "Reductive dissociation of bare Pt(IV) prodrugs produces elusive open-shell Pt(III) species".
24. ASMS Conference 2020 Reboot tenutasi in remoto, 1-12 giugno 2020. Presentazione di un poster dal titolo: "Dissociation of mass-isolated encounter complexes of platinum(IV) prodrugs and ascorbic acid elucidates details on their bioactivation".
25. XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica presso Bari (BA), 9-12 Settembre 2019. Presentazione orale dal titolo: "Reaching a new level of understanding of the bioinorganic chemistry of Pt drugs using MS-based techniques".
26. XXII International Mass Spectrometry Conference tenutasi a Firenze (FI), 26-31 agosto 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Elusive monofunctional adducts of cisplatin with natural aminoacids revealed by IRMPD spectroscopy and photofragmentation kinetics".
27. XXIV IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC24) presso Faro, Portogallo, 1-6 luglio 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Structural insights into non-covalent halide adducts with tyrosine and 3-nitrotyrosine using ion-spectroscopy".
28. XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada, 29 novembre– 2 dicembre 2017. Presentazione orale



- dal titolo: "MS coupled with IRMPD spectroscopy and fixed-wavelength kinetics to disclose isomeric mixtures of antitumor Pt(II)-complexes with amino acids".
29. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana tenutosi a Paestum (SA), 10-14 settembre 2017. Presentazione di un poster dal titolo: "Structural characterization and reactivity of bare cis- and transplatin hydrolysis products".
 30. XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa a Roma (RM), 6-8 settembre 2016. Presentazione orale dal titolo: "Exploring ligand substitution mechanisms at the molecular level with IRMPD/MS: the case of cisplatin" e presentazione poster intitolato: "Distinction between Cyanidin 3-O-glucoside and Cyanidin 3-O-galactoside by mass spectrometry combined with IRMPD spectroscopy".
 31. 1st NatMedDay workshop presso Aboca, SanSepolcro (AR) 22-23 settembre 2015. Presentazione di un poster intitolato: "Probing Biomolecules of Nutritional Interest: IRMPD Spectroscopy of Bare Protonated Pantothenic Acid".
 32. Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino (MC), 9-12 settembre 2015. Presentazione di un poster dal titolo: "Cisplatin reactions with model biological ligands monitored by IR multiphoton dissociation spectroscopy".
 33. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2016.
 34. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1800€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2017.
 35. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2018.
 36. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 2 (2000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2020.
 37. Assegnazione di BeamTime da parte dell'Advisory Committee del FELIX laboratory per lo svolgimento del progetto "Discrimination of isomeric flavanones based on IR ion spectroscopy" (FELIX-2021-01-11).

VALUTAZIONE DEI TITOLI

Il candidato Davide Corinti si è laureato con la votazione di 110/110 e lode in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza nel 2014 discutendo una tesi dal titolo "Interazione tra cisplatino ed



istidina: uno studio integrato sperimentale e teorico". Nel 2018 ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche con la votazione di Eccellente con lode presso la medesima Università discutendo una tesi dal titolo "Exploiting MS-based techniques to unveil elusive reaction intermediates of bioinorganic relevance".

Nel 2015, 2019, 2020 e 2021 è stato titolare di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" durante i quali ha svolto attività di ricerca pienamente inerente al SSD oggetto del concorso partecipando a numerosi progetti di ricerca. In particolare ha applicato la spettrometria di massa, la spettroscopia vibrazionale in fase gassosa e metodi di calcolo quanto-meccanici per lo studio di specie di interesse bio-inorganico e farmaceutico.

Il Dott. Davide Corinti è stato titolare di fondi di ricerca sovvenzionati da Sapienza come progetti di Avvio alla Ricerca (n. 4 progetti negli anni 2016, 2017, 2018, 2020).

Nel 2021 gli è stato assegnato un periodo di Beam Time (6 giorni) presso il centro EU di spettroscopia laser FELIX laboratory (Radboud University, Nijmegen, Netherlands).

Il Candidato ha partecipato a numerosi congressi nazionali e internazionali ed è stato relatore di 5 comunicazioni orali ed ha presentato 7 poster.

Il candidato è risultato vincitore dei seguenti premi a livello nazionale ed internazionale:

- Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 da parte della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana;
- Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018 per l'articolo "Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy";
- Lake Louise Student Travel Awards a Novembre 2017 per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada;
- Best Poster Prize al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa (2016), Roma;
- Best Poster Prize al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica (2015), Camerino.

Il candidato ha svolto un'intensa attività didattica a livello universitario presso "La Sapienza":

- a.a. 2019/2020 e 2020/2021 : Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche;



- a.a. 2019/2020: attività di tutorato per l'insegnamento di Chimica del corso di laurea triennale in Ingegneria Energetica presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria;
e presso l'Università dell'Aquila:
a.a. 2018/2019, 2019/2020 e 2020/2021: Incarico di docenza per l'Insegnamento "Chimica Bioinorganica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila.

L'analisi dei titoli prodotti dal candidato ha evidenziato un profilo curricolare di ottimo livello, sia per la continuità temporale dell'attività svolta in ambiti di ricerca attinenti alle tematiche richieste nel bando del presente concorso, sia per la parallela attività didattica che gli è stata affidata per la sua competenza nel Dipartimento di afferenza e nel Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria ("La Sapienza") e nel Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche (Università degli Studi dell'Aquila). È inoltre rilevante che il candidato è stato titolare di fondi di ricerca a testimonianza di una crescente autonomia scientifica.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

1. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Binding to Biological Ligands Revealed at the Encounter Complex Level by IR Action Spectroscopy, *Chem. - A Eur. J.* 22 (2016) 3794–3803.

In questo lavoro è stato esaminato il processo di sostituzione da parte di modelli di leganti biologici al cisplatino. Dapprima è stata evidenziata la formazione del complesso di incontro tra la forma attivata del farmaco (specie monoidrata) ed i leganti esaminati; successivamente tali complessi sono stati caratterizzati mediante spettroscopia vibrazionale di ioni in fase gassosa (IRMPD) e calcoli quanto-meccanici delle specie coinvolte nel profilo di reazione. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

2. **D. Corinti**, A. De Petris, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Primary Complex with L-Histidine Target Revealed by IR Multiple Photon Dissociation (IRMPD) Spectroscopy, *ChemPhysChem.* 18 (2017) 318–325.

Il lavoro descrive la identificazione e caratterizzazione del complesso di prima interazione tra il cisplatino e l'amino acido L-istidina, che costituisce uno tra i siti preferenziali di attacco del metallo-farmaco a proteine. L'utilizzo di cinetiche eseguite mediante spettroscopia vibrazionale d'azione (IRMPD) ha permesso di condurre un'analisi semiquantitativa delle specie isomeriche



formate in soluzione. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

3. R. Paciotti, **D. Corinti**, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C. Coletti, N. Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. Elisa Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (2017) 26697–26707.

Questo studio si è avvalso di spettrometria di massa tandem, spettroscopia IRMPD e calcoli quanto-meccanici per la identificazione e caratterizzazione strutturale dei complessi di cis- e trans-platino con l'amino acido metionina. Il lavoro ha evidenziato l'attacco preferenziale del Pt(II) all'atomo di zolfo per l'isomero cis-platino e all'atomo di azoto del gruppo aminico per l'isomero trans-platino. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

4. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, S. Piccirillo, M. Giampà, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Hydrolysis of cis- and transplatin: structure and reactivity of the aqua complexes in a solvent free environment, *RSC Adv.* 7 (2017) 15877–15884.

In questo lavoro la reattività degli intermedi chiave mono e di-idratati del cis- e trans-platino con leganti selezionati tra nucleofili allo zolfo, all'azoto e all'ossigeno è stata seguita tramite reazioni ione-molecola in fase gassosa con spettrometria di massa FT-ICR. I risultati hanno evidenziato in generale una velocità superiore per la reazione di sostituzione dei complessi mono-idratati. La struttura dei complessi di-idratati è stata caratterizzata mediante spettroscopia vibrazionale IRMPD. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

5. **D. Corinti**, B. Gregori, L. Guidoni, D. Scuderi, T.B. McMahon, B. Chiavarino, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Complexation of halide ions to tyrosine: role of non-covalent interactions evidenced by IRMPD spectroscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (2018) 4429–4441.

Questo lavoro descrive i motivi di legame degli ioni alogenuro (Cl^- , Br^- , I^-) con l'amino acido L-tirosina ed il suo derivato 3-nitrotirosina, un bio-marker della reazione di nitratura delle proteine. Le evidenze spettroscopiche mostrano la presenza di vari modi di interazione alogeno-aminoacido. In particolare, si osserva un contributo maggiore da parte degli isomeri in cui l'anione è legato al sito fenolico con l'aumentare delle dimensioni dell'alogenuro. Nei



nitroderivati si osserva invece un attacco prevalente dell'anione all'anello aromatico depauperato di elettroni. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

6. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maître, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Short lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy, *Int. J. Mass Spectrom.* 435 (2019) 7–17.

Questo lavoro riporta un'analisi del processo di sostituzione del cisplatino da parte di ammidi, urea e tiourea quali modelli di gruppi funzionali biologici. Complessi formalmente penta-coordinati sono stati selezionati e caratterizzati quali addotti non covalenti tra l'aqua-complesso del cisplatino ed i leganti selezionati mediante spettroscopia vibrazionale IRMPD e calcoli quanto-meccanici. Il lavoro è pubblicato su rivista di buon livello (Q2), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

7. A. Theisen, R. Black, **D. Corinti**, J.M. Brown, B. Bellina, P.E. Barran, Initial Protein Unfolding Events in Ubiquitin, Cytochrome c and Myoglobin Are Revealed with the Use of 213 nm UVPD Coupled to IM-MS, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 30 (2019) 24–33.

In questo studio gli eventi iniziali di unfolding delle proteine ubiquitina, citocromo c e mioglobina sono stati evidenziati tramite processi di fotodissociazione indotta da fotoni UV a 213 nm. Tale luce è stata introdotta nella regione strumentale che precede la separazione degli ioni proteici mediante ion mobility (IM) permettendo di caratterizzare i siti proteici maggiormente coinvolti nel processo di unfolding. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

8. **D. Corinti**, A. Maccelli, B. Chiavarino, P. Maitre, D. Scuderi, E. Bodo, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Vibrational signatures of curcumin's chelation in copper(II) complexes: An appraisal by IRMPD spectroscopy, *J. Chem. Phys.* 150 (2019) 165101.

Il lavoro descrive l'effetto della protonazione e della coordinazione con Cu(II) della molecola di curcumina, un polifenolo naturale con un largo spettro di attività di rilevanza biologica. Le strutture sono state testate mediante spettrometria di massa tandem, spettroscopia vibrazionale IRMPD e calcoli quanto-meccanici. I risultati mostrano che il metallo interagisce con entrambi i gruppi enolici dando luogo ad una struttura planare ed altamente simmetrica,



mentre la specie protonata risulta esistere in due differenti forme isomeriche, quella cheto-enolica e quella dichetonica. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

9. P. Maitre, D. Scuderi, **D. Corinti**, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Applications of Infrared Multiple Photon Dissociation (IRMPD) to the Detection of Posttranslational Modifications, *Chem. Rev.* 120 (2020) 3261–3295.

Il lavoro è una review riguardante l'utilizzo della spettroscopia vibrazionale ionica IRMPD per il riconoscimento e la localizzazione di modifiche post-traduzionali in aminoacidi, peptidi e proteine. Tali modifiche, che includono tra l'altro solfonazione, fosforilazione, ossidazione, nitrosazione, nitrificazione e metilazione, sono rivelate tramite processi di frammentazione selettiva a specifiche lunghezza d'onda, ponendo la base per lo sviluppo di protocolli analitici atti ad integrare analisi strutturali di peptidi e proteine. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

10. **D. Corinti**, M.E. Crestoni, S. Fornarini, E. Dabbish, E. Sicilia, E. Gabano, E. Perin, D. Osella, A multimethodological inquiry of the behavior of cisplatin-based Pt(IV) derivatives in the presence of bioreductants with a focus on the isolated encounter complexes, *JBIC J. Biol. Inorg. Chem.* 25 (2020) 655–670.

Questo lavoro interdisciplinare chiarisce il meccanismo di riduzione di complessi di Pt(IV) in presenza di agenti riducenti quale l'acido ascorbico mediante un approccio combinato basato su spettroscopia NMR, IRMPD, spettrometria di massa e calcoli quanto-meccanici. Il comportamento peculiare di tali complessi è stato descritto a livello molecolare evidenziando l'importanza dei leganti idrossido legati al Pt(IV) per l'attivazione del processo di riduzione. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

11. **D. Corinti**, G. Frison, B. Chiavarino, E. Gabano, D. Osella, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Can an Elusive Platinum(III) Oxidation State be Exposed in an Isolated Complex?, *Angew. Chemie Int. Ed.* 59 (2020) 15595–15598.

Questo studio descrive la formazione mediante CID (collision induced dissociation) di specie ridotte dove il Pt ha uno stato di ossidazione formale pari a +3 a partire da profarmaci deprotonati contenenti Pt(IV). La localizzazione del radicale sia sull'atomo metallico che sul gruppo NH₂, che



agisce da legante non-innocente, è verificata mediante spettroscopia IRMPD e calcoli a livello DFT, MP2 e CCSD. Questa indagine rappresenta uno dei pochi esempi dove la specie elusiva Pt(III) è messa in evidenza come intermedio stabile. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

12. B. Chiavarino, R.K. Sinha, M.E. Crestoni, **D. Corinti**, A. Filippi, C. Fraschetti, D. Scuderi, P. Maitre, S. Fornarini, Binding Motifs in the Naked Complexes of Target Amino Acids with an Excerpt of Antitumor Active Biomolecule: An Ion Vibrational Spectroscopy Assay, *Chem. – A Eur. J.* 27 (2021) 2348–2360.

Questo lavoro descrive la natura delle interazioni tra una porzione di glabrescione B (cromone), una piccola molecola naturale con potenziale attività antitumorale, con gli aminoacidi istidina e lisina, quali modelli dei residui proteici presenti nel sito attivo del recettore bersaglio. Il ruolo della formazione di complessi non covalenti è messo in evidenza dagli spettri vibrazionali IRMPD che mostrano le caratteristiche di potente accettore di legame H da parte del gruppo carbonilico del cromone. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il Candidato Davide Corinti presenta alla valutazione una produzione complessiva pari a 12 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS con un rank JCR ottimo (11/12 in Q1, 1/12 in Q2).

Valutazione della produzione complessiva

Il candidato DAVIDE CORINTI è coautore di 12 pubblicazioni, in 8 è primo autore e in una è corresponding author.

Dai lavori presentati si evidenzia che il Candidato ha acquisito esperienza e maturità in ambiti di ricerca congruenti con le tematiche richieste nel bando del presente concorso. La notevole produzione scientifica, continua nel tempo e collocata su riviste internazionali di elevato livello editoriale, è valutabile molto positivamente in base ai seguenti valori degli indici bibliometrici: IF totale=101.4; IF medio=8,4; Numero totale di citazioni=154; Numero medio di citazioni per prodotto: 12.8; Indice H= 9.



Il contributo come primo autore in 8 pubblicazioni e come autore di riferimento in una pubblicazione evidenzia l'ottimo livello scientifico del candidato nel campo della ricerca su tematiche attinenti al SSD-CHIM03.

Commissario 2
Prof. Nazzareno Re

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA (titolo Doctor Europaeus) in Scienze Farmaceutiche conseguito il 21/12/2018 con votazione ottimo con Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Tesi originale allegata).
2. Lettera di referenze della Prof.ssa Perdita Barran attestante le competenze acquisite nel periodo di 3 mesi passato nei laboratori dell'Università di Manchester (01/03/2017 – 31/05/2017).
3. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 02/01/2015 al 30/10/2015.
4. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2019 al 30/06/2020.
5. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2020.
6. Titolarità di Borsa di studio per Attività di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 03/12/2018 al 30/04/2019.
7. Titolarità di assegno per attività di tutorato per l'insegnamento di Chimica del corso di laurea triennale in Ingegneria Energetica presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" per l'anno accademico 2019/2020.
8. Incarico di docenza per l'Insegnamento "Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica" del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche di Sapienza – Università di Roma per gli anni accademici 2019/2020 e 2020/2021.
9. Incarico di docenza per l'Insegnamento di "Chimica Bioinorganica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila per gli anni accademici: 2018/2019, 2019/2020 e 2020/2021.
10. Partecipazione all'EU FT-ICR MS Short Course 4 presso Warwick, UK.



11. Partecipazione in qualità di membro del comitato organizzatore all'EU FT-ICR MS Short Course 3 tenutosi a Roma.
12. Partecipazione alla Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica per Dottorandi 2019 presso la sede centrale del CNR di Roma (RM).
13. Partecipazione all'EU FT-ICR MS End User School 1 presso Joensuu, Finlandia.
14. Partecipazione alla CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques tenutasi a Trieste (TS).
15. Partecipazione al XX Corso di Spettrometria di Massa presso la Certosa di Pontignano (SI).
16. Partecipazione alla I Scuola di Spettrometria di Massa in Ambito Farmaceutico presso Angelini S.P.A., S. Palomba (RM).
17. Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 da parte della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana.
18. Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018 per l'articolo "Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy".
19. Lake Louise Student Travel Awards a Novembre 2017 per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada.
20. Best Poster Prize al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa tenutosi a Roma (RM).
21. Best Poster Prize al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino.
22. Partecipazione all'ACS Spring 2021, congresso in remoto, 5-16 aprile 2021. Presentazione orale dal titolo: "Cisplatin ligand substitution by aminoacids: structure and reactivity of isolated encounter complexes".
23. Inorganic Reaction Mechanisms Group meeting tenutosi in remoto, 7 luglio 2020. Presentazione orale dal titolo: "Reductive dissociation of bare Pt(IV) prodrugs produces elusive open-shell Pt(III) species".
24. ASMS Conference 2020 Reboot tenutasi in remoto, 1-12 giugno 2020. Presentazione di un poster dal titolo: "Dissociation of mass-isolated encounter complexes of platinum(IV) prodrugs and ascorbic acid elucidates details on their bioactivation".
25. XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica presso Bari (BA), 9-12 Settembre 2019. Presentazione orale dal titolo: "Reaching a new level of understanding of the bioinorganic chemistry of Pt drugs using MS-based techniques".
26. XXII International Mass Spectrometry Conference tenutasi a Firenze (FI), 26-31 agosto 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Elusive



- monofunctional adducts of cisplatin with natural aminoacids revealed by IRMPD spectroscopy and photofragmentation kinetics”.
27. XXIV IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC24) presso Faro, Portogallo, 1-6 luglio 2018. Presentazione di un poster dal titolo: “Structural insights into non-covalent halide adducts with tyrosine and 3-nitrotyrosine using ion-spectroscopy”.
 28. XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada, 29 novembre– 2 dicembre 2017. Presentazione orale dal titolo: “MS coupled with IRMPD spectroscopy and fixed-wavelength kinetics to disclose isomeric mixtures of antitumor PtII-complexes with amino acids”.
 29. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana tenutosi a Paestum (SA), 10-14 settembre 2017. Presentazione di un poster dal titolo: “Structural characterization and reactivity of bare cis- and transplatin hydrolysis products”.
 30. XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa a Roma (RM), 6-8 settembre 2016. Presentazione orale dal titolo: “Exploring ligand substitution mechanisms at the molecular level with IRMPD/MS: the case of cisplatin”
e presentazione poster intitolato: “Distinction between Cyanidin 3-O-glucoside and Cyanidin 3-O-galactoside by mass spectrometry combined with IRMPD spectroscopy”.
 31. 1st NatMedDay workshop presso Aboca, SanSepolcro (AR) 22-23 settembre 2015. Presentazione di un poster intitolato: “Probing Biomolecules of Nutritional Interest: IRMPD Spectroscopy of Bare Protonated Pantothenic Acid”.
 32. Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino (MC), 9-12 settembre 2015. Presentazione di un poster dal titolo: “Cisplatin reactions with model biological ligands monitored by IR multiphoton dissociation spectroscopy”.
 33. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2016.
 34. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1800€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2017.
 35. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2018.
 36. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 2 (2000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2020.
 37. Assegnazione di BeamTime da parte dell'Advisory Committee del FELIX laboratory per lo svolgimento del progetto “Discrimination of isomeric



flavanones based on IR ion spectroscopy" (FELIX-2021-01-11).

VALUTAZIONE DEI TITOLI

Il candidato Davide Corinti si è laureato nel 2014 in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza con la votazione di 110/110 e lode discutendo una tesi dal titolo "Interazione tra cisplatino ed istidina: uno studio integrato sperimentale e teorico" e, nel corso del 2015 è stato titolare di un assegno di ricerca presso la stessa Università. Dal 2015 al 2018 ha seguito il Corso di dottorato in Scienze Farmaceutiche, sempre presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza, conseguendo il Dottorato di Ricerca (con il titolo di Doctor Europaeus) con la votazione di ottimo con lode discutendo una tesi dal titolo "Exploiting MS-based techniques to unveil elusive reaction intermediates of bioinorganic relevance".

Nel 2019 è stato titolare di una Borsa di ricerca semestrale e dal 2019 ad oggi è titolare di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" svolgendo attività di ricerca pienamente congruenti con il SSD oggetto del concorso, riguardanti in particolare la spettrometria di massa, la spettroscopia vibrazionale in fase gassosa e metodi di calcolo quanto-meccanici per lo studio di specie di interesse bio-inorganico e farmaceutico.

Ha partecipato a diversi corsi e scuole a livello nazionale ed internazionale, in particolare nel campo della spettrometria di massa e della chimica bioinorganica.

Il candidato è risultato assegnatario di fondi di ricerca finanziati dall'Università di Roma come progetti di Avvio alla Ricerca, in particolare 4 progetti negli anni 2016, 2017, 2018, 2020.

Nel 2021 gli è stato attribuito un periodo di Beam Time (6 giorni) presso il centro EU di spettroscopia laser FELIX laboratory (Radboud University, Nijmegen, Netherlands).

Il Candidato ha partecipato a numerosi congressi nazionali e internazionali, in 5 delle quali è stato relatore mentre in 7 ha presentato un poster.

Il candidato ha conseguito diversi premi a livello nazionale ed internazionale:

- Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 da parte della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana;
- Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018 per l'articolo "Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy";



- Lake Louise Student Travel Awards a Novembre 2017 per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada;
- Best Poster Prize al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa (2016), Roma;
- Best Poster Prize al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica (2015), Camerino.

Il candidato ha svolto diverse attività didattica a livello universitario presso l'Università di Roma "La Sapienza":

- a.a. 2019/2020 e 2020/2021, Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche;
- a.a. 2019/2020, attività di tutorato per l'insegnamento di Chimica del corso di laurea triennale in Ingegneria Energetica presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria;

e presso l'Università dell'Aquila:

a.a. 2018/2019, 2019/2020 e 2020/2021: Incarico di docenza per l'Insegnamento "Chimica Bioinorganica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila.

Dall'analisi dei titoli prodotti dal candidato emerge un curriculum di ottimo livello, sia per quanto riguarda le attività di ricerca sia per quanto riguarda l'attività didattica svolta nel Dipartimento di afferenza e nel Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria ("La Sapienza") e nel Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche (Università degli Studi dell'Aquila). Di rilievo l'acquisizione da parte del candidato di diversi fondi di ricerca da cui si evince la maturazione di un buon livello di autonomia scientifica.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Il Candidato Davide Corinti presenta alla valutazione 12 pubblicazioni tutte su tematiche attinenti al SSD-CHIM03 e di ottimo livello come testimoniato dal fatto che ben 11 di esse sono collocate nel primo quartile nella classificazione WoS/ISI sulla base degli IF JCR e 1 nel secondo quartile.

Il contributo come primo autore in otto pubblicazioni e come autore di riferimento in una pubblicazione evidenzia l'ottimo apporto individuale del candidato alla ricerca svolta.

Ottima la loro collocazione editoriale come si evince da un IF totale di 101.4, con due lavori pubblicati su riviste di rilievo assoluto con IF di 15.3 e 60.6, IF medio di 8.4; Numero totale di citazioni=171 e indice H di 8.



1. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Binding to Biological Ligands Revealed at the Encounter Complex Level by IR Action Spectroscopy, *Chem. - A Eur. J.* 22 (2016) 3794–3803.

Il lavoro affronta con un approccio molto innovativo e originale lo studio dei processi di sostituzione da parte di modelli di leganti biologici al cisplatino, ed è stato condotto con ottimo rigore metodologico. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

2. **D. Corinti**, A. De Petris, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Primary Complex with L-Histidine Target Revealed by IR Multiple Photon Dissociation (IRMPD) Spectroscopy, *ChemPhysChem.* 18 (2017) 318–325.

Il lavoro presenta aspetti innovativi e originali nell'ambito dell'identificazione e caratterizzazione del complesso di prima interazione tra il cisplatino e l'amino acido L-istidina, ed è stato condotto con ottimo rigore metodologico. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

3. R. Paciotti, **D. Corinti**, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C. Coletti, N. Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. Elisa Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (2017) 26697–26707.

In questo lavoro si studia con un approccio innovativo e originale l'identificazione e la caratterizzazione strutturale dei complessi di cis- e trans-platino con l'amino acido metionina mediante tecniche di spettrometria di massa tandem, spettroscopia IRMPD e calcoli quanto-meccanici. Il lavoro è stato condotto con ottimo rigore metodologico ed è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile.

4. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, S. Piccirillo, M. Giampà, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Hydrolysis of cis- and transplatin: structure and reactivity of the



aqua complexes in a solvent free environment, *RSC Adv.* 7 (2017) 15877–15884.

In questa pubblicazione viene studiata la reattività degli intermedi chiave mono e di-idratati del cis- e trans-platino con leganti selezionati tra nucleofili allo zolfo, all'azoto e all'ossigeno tramite reazioni ione-molecola in fase gassosa con spettrometria di massa FT-ICR. Lo studio è stato condotto con ottimo rigore metodologico. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

5. **D. Corinti**, B. Gregori, L. Guidoni, D. Scuderi, T.B. McMahon, B. Chiavarino, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Complexation of halide ions to tyrosine: role of non-covalent interactions evidenced by IRMPD spectroscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (2018) 4429–4441.

Questo lavoro affronta con originalità e innovatività la natura del legame degli ioni alogenuro (Cl^- , Br^- , I^-) con l'amino acido L-tirosina ed il suo derivato 3-nitrotirosina, un bio-marker della reazione di nitratura delle proteine. Lo studio è stato condotto con ottimo rigore metodologico. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

6. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maître, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Short lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy, *Int. J. Mass Spectrom.* 435 (2019) 7–17.

Il lavoro analizza con rigore metodologico il processo di sostituzione del cisplatino da parte di ammidi, urea e tiourea. Il lavoro è originale e innovativo e del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 nonché attinente alle tematiche del bando. Buona la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel secondo quartile. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

7. A.Theisen, R. Black, **D. Corinti**, J.M. Brown, B. Bellina, P.E. Barran, Initial Protein Unfolding Events in Ubiquitin, Cytochrome c and Myoglobin Are Revealed with the Use of 213 nm UVPD Coupled to IM-MS, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 30 (2019) 24–33.



In questo lavoro vengono studiati con un approccio innovativo e originale gli eventi iniziali di unfolding delle proteine ubiquitina, citocromo c e mioglobina sono stati evidenziati tramite processi di fotodissociazione indotta da fotoni UV a 213 nm. Lo studio è stato condotto con ottimo rigore metodologico. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile.

8. **D. Corinti**, A. Maccelli, B. Chiavarino, P. Maitre, D. Scuderi, E. Bodo, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Vibrational signatures of curcumin's chelation in copper(II) complexes: An appraisal by IRMPD spectroscopy, *J. Chem. Phys.* 150 (2019) 165101.

Il lavoro descrive in maniera originale ed innovativa l'effetto della protonazione e della coordinazione con Cu(II) della molecola di curcumina, un polifenolo naturale con un largo spettro di attività di rilevanza biologica. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 ed è stato condotto con ottimo rigore metodologico. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

9. P. Maitre, D. Scuderi, **D. Corinti**, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Applications of Infrared Multiple Photon Dissociation (IRMPD) to the Detection of Posttranslational Modifications, *Chem. Rev.* 120 (2020) 3261–3295.

Questa review riguarda l'utilizzo della spettroscopia vibrazionale ionica IRMPD per il riconoscimento e la localizzazione di modifiche post-traduzionali in aminoacidi, peptidi e proteine, ed è stata condotta con estremo rigore metodologico. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 ed è attinente alle tematiche del bando. Eccellente la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile con un IF particolarmente elevato di 60.6.

10. **D. Corinti**, M.E. Crestoni, S. Fornarini, E. Dabbish, E. Sicilia, E. Gabano, E. Perin, D. Osella, A multimethodological inquiry of the behavior of cisplatin-based Pt(IV) derivatives in the presence of bioreductants with a focus on the isolated encounter complexes, *JBIC J. Biol. Inorg. Chem.* 25 (2020) 655– 670.

Questo lavoro chiarisce il meccanismo di riduzione di complessi di Pt(IV) in presenza di agenti riducenti quale l'acido ascorbico mediante un approccio combinato basato su spettroscopia NMR, IRMPD, spettrometria di massa e



calcoli quanto-meccanici. Il lavoro è stato condotto con rigore metodologico e presenta aspetti innovativi ed originali. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

11. **D. Corinti**, G. Frison, B. Chiavarino, E. Gabano, D. Osella, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Can an Elusive Platinum(III) Oxidation State be Exposed in an Isolated Complex?, *Angew. Chemie Int. Ed.* 59 (2020) 15595–15598.

In questo lavoro viene studiata la formazione mediante CID (collision induced dissociation) di specie ridotte dove il Pt ha uno stato di ossidazione formale pari a +3 a partire da profarmaci deprotonati contenenti Pt(IV). Il lavoro è stato condotto con rigore metodologico e presenta notevoli aspetti innovativi ed originali. Esso è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 ed attinente alle tematiche del bando. Eccellente la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile con un IF molto elevato di 15.3. Ottimo l'apporto individuale del candidato che risulta primo autore.

12. B. Chiavarino, R.K. Sinha, M.E. Crestoni, **D. Corinti**, A. Filippi, C. Fraschetti, D. Scuderi, P. Maitre, S. Fornarini, Binding Motifs in the Naked Complexes of Target Amino Acids with an Excerpt of Antitumor Active Biomolecule: An Ion Vibrational Spectroscopy Assay, *Chem. – A Eur. J.* 27 (2021) 2348–2360.

Questo lavoro affronta con un approccio originale ed innovativo la natura delle interazioni tra una porzione di glabrescione B (cromone), una piccola molecola naturale con potenziale attività antitumorale, con gli aminoacidi istidina e lisina, quali modelli dei residui proteici presenti nel sito attivo del recettore bersaglio. Lo studio è stato condotto con ottimo rigore metodologico. Il lavoro è del tutto congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando. Ottima la collocazione editoriale del lavoro, pubblicato su rivista nel primo quartile.



CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione complessiva del Candidato DAVIDE CORINTI consiste in 25 pubblicazioni censite sulla banca dati SCOPUS, con i seguenti indicatori bibliometrici:

- Numero totale di citazioni: 219
- Numero medio di citazioni per prodotto: 8.4
- Indice di Hirsch: 9

Valutazione della produzione complessiva

La produzione scientifica del candidato è di ottimo livello sia in termini di consistenza complessiva sia in termini di intensità e continuità temporale della stessa negli ultimi 5 anni in ambiti di ricerca attinenti alle tematiche del SSD CHIM/03.

Ottimi i valori bibliometrici presentati dal candidato, in relazione alla giovane età accademica di soli 5 anni.

Commissario 3

Prof. Mauro Ravera

TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA (titolo Doctor Europaeus) in Scienze Farmaceutiche conseguito il 21/12/2018 con votazione ottimo con Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Tesi originale allegata).
2. Lettera di referenze della Prof.ssa Perdita Barran attestante le competenze acquisite nel periodo di 3 mesi passato nei laboratori dell'Università di Manchester (01/03/2017 – 31/05/2017).
3. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 02/01/2015 al 30/10/2015.
4. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2019 al 30/06/2020.
5. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2020.



6. Titolarità di Borsa di studio per Attività di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 03/12/2018 al 30/04/2019.
7. Titolarità di assegno per attività di tutorato per l'insegnamento di Chimica del corso di laurea triennale in Ingegneria Energetica presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" per l'anno accademico 2019/2020.
8. Incarico di docenza per l'Insegnamento "Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica" del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche di Sapienza – Università di Roma per gli anni accademici 2019/2020 e 2020/2021.
9. Incarico di docenza per l'Insegnamento di "Chimica Bioinorganica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila per gli anni accademici: 2018/2019, 2019/2020 e 2020/2021.
10. Partecipazione all'EU FT-ICR MS Short Course 4 presso Warwick, UK.
11. Partecipazione in qualità di membro del comitato organizzatore all'EU FT-ICR MS Short Course 3 tenutosi a Roma.
12. Partecipazione alla Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica per Dottorandi 2019 presso la sede centrale del CNR di Roma (RM).
13. Partecipazione all'EU FT-ICR MS End User School 1 presso Joensuu, Finlandia.
14. Partecipazione alla CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques tenutasi a Trieste (TS).
15. Partecipazione al XX Corso di Spettrometria di Massa presso la Certosa di Pontignano (SI).
16. Partecipazione alla I Scuola di Spettrometria di Massa in Ambito Farmaceutico presso Angelini S.P.A., S. Palomba (RM).
17. Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 da parte della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana.
18. Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018 per l'articolo "Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy".
19. Lake Louise Student Travel Awards a Novembre 2017 per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada.
20. Best Poster Prize al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa tenutosi a Roma (RM).
21. Best Poster Prize al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino.



22. Partecipazione all'ACS Spring 2021, congresso in remoto, 5-16 aprile 2021. Presentazione orale dal titolo: "Cisplatin ligand substitution by aminoacids: structure and reactivity of isolated encounter complexes".
23. Inorganic Reaction Mechanisms Group meeting tenutosi in remoto, 7 luglio 2020. Presentazione orale dal titolo: "Reductive dissociation of bare Pt(IV) prodrugs produces elusive open-shell Pt(III) species".
24. ASMS Conference 2020 Reboot tenutasi in remoto, 1-12 giugno 2020. Presentazione di un poster dal titolo: "Dissociation of mass-isolated encounter complexes of platinum(IV) prodrugs and ascorbic acid elucidates details on their bioactivation".
25. XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica presso Bari (BA), 9-12 Settembre 2019. Presentazione orale dal titolo: "Reaching a new level of understanding of the bioinorganic chemistry of Pt drugs using MS-based techniques".
26. XXII International Mass Spectrometry Conference tenutasi a Firenze (FI), 26-31 agosto 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Elusive monofunctional adducts of cisplatin with natural aminoacids revealed by IRMPD spectroscopy and photofragmentation kinetics".
27. XXIV IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC24) presso Faro, Portogallo, 1-6 luglio 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Structural insights into non-covalent halide adducts with tyrosine and 3-nitrotyrosine using ion-spectroscopy".
28. XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada, 29 novembre– 2 dicembre 2017. Presentazione orale dal titolo: "MS coupled with IRMPD spectroscopy and fixed-wavelength kinetics to disclose isomeric mixtures of antitumor PtII-complexes with amino acids".
29. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana tenutosi a Paestum (SA), 10-14 settembre 2017. Presentazione di un poster dal titolo: "Structural characterization and reactivity of bare cis- and transplatin hydrolysis products".
30. XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa a Roma (RM), 6-8 settembre 2016. Presentazione orale dal titolo: "Exploring ligand substitution mechanisms at the molecular level with IRMPD/MS: the case of cisplatin" e presentazione poster intitolato: "Distinction between Cyanidin 3-O-glucoside and Cyanidin 3-O-galactoside by mass spectrometry combined with IRMPD spectroscopy".
31. 1st NatMedDay workshop presso Aboca, SanSepolcro (AR) 22-23 settembre 2015. Presentazione di un poster intitolato: "Probing



- Biomolecules of Nutritional Interest: IRMPD Spectroscopy of Bare Protonated Pantothenic Acid”.
32. Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino (MC), 9-12 settembre 2015. Presentazione di un poster dal titolo: “Cisplatin reactions with model biological ligands monitored by IR multiphoton dissociation spectroscopy”.
 33. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2016.
 34. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1800€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2017.
 35. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2018.
 36. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 2 (2000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2020.
 37. Assegnazione di BeamTime da parte dell’Advisory Committee del FELIX laboratory per lo svolgimento del progetto “Discrimination of isomeric flavanones based on IR ion spectroscopy” (FELIX-2021-01-11).

VALUTAZIONE DEI TITOLI

Il candidato Davide Corinti ha conseguito il dottorato di ricerca in Scienze Farmaceutiche in data 21/12/2018 presso l’Università di Roma “La Sapienza” con la votazione di ottimo con lode. Tale titolo è tra quelli preferenziali elencati nel bando di reclutamento all’art. 2. Degna di nota è l’assegnazione del Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 ricevuto dal candidato dalla Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana.

Durante il periodo di dottorato ha svolto un periodo di ricerca (01/03/2017 – 31/05/2017) presso la Prof.ssa Perdita Barran all’Università di Manchester.

Precedentemente e successivamente allo svolgimento del dottorato, è stato titolare di due assegni di ricerca ed una borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell’Università di Roma “La Sapienza” della durata complessiva di 26 mesi. Da luglio 2020 è titolare di un assegno di ricerca sempre presso la stessa istituzione.

La formazione scientifica di Davide Corinti si è completata anche con la partecipazione a diversi corsi di formazione nazionali ed internazionali (EU FT-ICR MS Short Course 3 e 4, EU FT-ICR MS End User School 1, Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica per Dottorandi 2019, CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques, XX Corso di Spettrometria di Massa, I Scuola di Spettrometria di Massa in Ambito Farmaceutico).



Inoltre il candidato presenta 5 comunicazioni orali a congresso e 7 comunicazioni poster in convegni nazionali ed internazionali che gli hanno permesso di ottenere due Best Poster Prize (al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa e al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica) ed un travel award (Lake Louise Student Travel Awards per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry Workshop).

La attività di ricerca presentata dal candidato è stata in parte finanziata dall'assegnazione di fondi all'interno del progetto Avvio alla Ricerca dell'Università di Roma "La Sapienza" nel 2016, 2017, 2018 e 2020.

L'attività didattica si è concentrata negli ultimi tre anni accademici (dal 2018/2019) con il tutorato per il corso di Chimica (CdL triennale in Ingegneria Energetica, Università di Roma "La Sapienza"), l'incarico di docenza per Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica (CdL in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Università di Roma "La Sapienza") e Chimica Bioinorganica (CdL Magistrale in Scienze Chimiche, Università dell'Aquila).

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

1. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Binding to Biological Ligands Revealed at the Encounter Complex Level by IR Action Spectroscopy, *Chem. - A Eur. J.* 22 (2016) 3794–3803.
In questo lavoro si fa uso della spettroscopia IR multiple photon dissociation (IRMPD) combinata a calcoli quanto-meccanici per esaminare il processo di sostituzione da parte di modelli di leganti biologici al cisplatino. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).
2. **D. Corinti**, A. De Petris, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Primary Complex with I-Histidine Target Revealed by IR Multiple Photon Dissociation (IRMPD) Spectroscopy, *ChemPhysChem.* 18 (2017) 318–325.
Il lavoro descrive la formazione del complesso tra il farmaco antitumorale cisplatino e l'amminoacido L-istidina. Tale complesso è stato isolato per electrospray ionization e caratterizzato in dettaglio con spettrometria di massa ad alta risoluzione (MS), tandem MS, spettroscopia IRMPD e calcoli quantomeccanici. Lo scopo finale del lavoro è studiare uno tra i siti preferenziali di attacco del cisplatino a proteine e condurre un'analisi semiquantitativa delle specie isomeriche formate in soluzione. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).



3. R. Paciotti, **D. Corinti**, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C. Coletti, N. Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. Elisa Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (2017) 26697–26707.
Questo studio è la naturale continuazione del lavoro precedente (#2) trattandosi della caratterizzazione strutturale dei complessi ottenuti dall'interazione tra cisplatino e transplatino con l'amminoacido metionina. Anche in questo caso è stata usata la combinazione di spettrometria di massa tandem, spettroscopia IRMPD e calcoli quanto-meccanici per evidenziare il diverso attacco preferenziale del cisplatino e del transplatino sull'amminoacido modello. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).
4. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, S. Piccirillo, M. Giampà, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Hydrolysis of cis- and transplatin: structure and reactivity of the aqua complexes in a solvent free environment, *RSC Adv.* 7 (2017) 15877–15884.
In questo lavoro è stata studiata l'interazione ione-molecola in fase gassosa di complessi mono- e di-acquati del cisplatino e del transplatino, cioè le specie responsabili della loro attività antitumorale, con leganti selezionati, che rappresentano bersagli di platinazione nell'ambiente biologico. La spettrometria di massa FT-ICR e la spettroscopia vibrazionale IRMPD hanno permesso la caratterizzazione degli intermedi generati. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).
5. **D. Corinti**, B. Gregori, L. Guidoni, D. Scuderi, T.B. McMahon, B. Chiavarino, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Complexation of halide ions to tyrosine: role of non-covalent interactions evidenced by IRMPD spectroscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (2018) 4429–4441.
I binding motifs negli addotti tra alogenuri e tirosina [Tyr + X] (X = Cl, Br, I) sono stati confrontati con gli analoghi con 3-nitrotirosina, un marcatore del danno cellulare. La combinazione della tecnica IRMPD con calcoli quantomeccanici ha permesso di fornire informazioni circa la geometria e le proprietà vibrazionali di probabili isomeri e interpretare gli spettri misurati. Il lavoro è parzialmente congruente con il SSD CHIM/03, ma certamente



attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

6. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maître, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Short lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy, *Int. J. Mass Spectrom.* 435 (2019) 7–17.

Lo studio della reazione tra il farmaco antitumorale cisplatino con una serie di semplici modelli molecolari (acetamide, dimetilacetammide, urea e tiourea) che mimano gruppi funzionali biologici è oggetto del presente lavoro. La tecnica ESI-MS e la spettroscopia IRMPD insieme ai calcoli quantomeccanici hanno permesso di caratterizzare la struttura degli addotti e il sito di platinazione. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di buon livello (Q2).

7. A. Theisen, R. Black, **D. Corinti**, J.M. Brown, B. Bellina, P.E. Barran, Initial Protein Unfolding Events in Ubiquitin, Cytochrome c and Myoglobin Are Revealed with the Use of 213 nm UVPD Coupled to IM-MS, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 30 (2019) 24–33.

Questo lavoro mostra come processi di fotodissociazione indotta da fotoni UV accoppiati ad un ion mobility mass spectrometer possano essere usati per studiare gli eventi iniziali di unfolding delle proteine utilizzando come modelli l'ubiquitina e le due metalloproteine citocromo c e mioglobina. Il lavoro è congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

8. **D. Corinti**, A. Maccelli, B. Chiavarino, P. Maitre, D. Scuderi, E. Bodo, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Vibrational signatures of curcumin's chelation in copper(II) complexes: An appraisal by IRMPD spectroscopy, *J. Chem. Phys.* 150 (2019) 165101.

Una dettagliata descrizione degli addotti Cu(II)-curcumina è stata ottenuta attraverso la combinazione della spettroscopia IRMPD, esperimenti CID (Collision-Induced Dissociation) e calcoli quantomeccanici come strumento biofisico per svelare i siti di coordinazione della curcumina. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

9. P. Maitre, D. Scuderi, **D. Corinti**, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Applications of Infrared Multiple Photon Dissociation (IRMPD) to the



Detection of Posttranslational Modifications, *Chem. Rev.* 120 (2020) 3261–3295.

Il lavoro #9 è una review riguardante l'utilizzo della spettroscopia IRMPD per il riconoscimento e la localizzazione di modifiche post-traduzionali in ioni da amminoacidi, peptidi e proteine selezionati attraverso tandem MS. Tale combinazione di tecniche permetterebbe lo sviluppo di protocolli analitici alternativi per l'analisi strutturale di peptidi e proteine. Il lavoro è congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di eccezionale livello (Q1).

10. **D. Corinti**, M.E. Crestoni, S. Fornarini, E. Dabbish, E. Sicilia, E. Gabano, E. Perin, D. Osella, A multimethodological inquiry of the behavior of cisplatin-based Pt(IV) derivatives in the presence of bioreductants with a focus on the isolated encounter complexes, *JBIC J. Biol. Inorg. Chem.* 25 (2020) 655–670.

Il meccanismo di riduzione di profarmaci ad attività antitumorale basati sul Pt(IV) in presenza di agenti riducenti (acido ascorbico) è stato studiato mediante l'approccio combinato di spettroscopia NMR, IRMPD, spettrometria di massa e calcoli quantomeccanici. I risultati hanno permesso di evidenziare l'importanza dei leganti idrossido legati assialmente al centro metallico nel meccanismo di riduzione. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

11. **D. Corinti**, G. Frison, B. Chiavarino, E. Gabano, D. Osella, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Can an Elusive Platinum(III) Oxidation State be Exposed in an Isolated Complex?, *Angew. Chemie Int. Ed.* 59 (2020) 15595–15598.

In questo lavoro viene riportata l'esistenza come intermedio stabile della specie elusiva Pt(III). Tale specie viene formata mediante CID (collision induced dissociation) di specie ridotte a partire da profarmaci contenenti Pt(IV). La spettroscopia IRMPD e calcoli a livello DFT, MP2 e CCSD hanno permesso di evidenziare la presenza di specie a formale stato di ossidazione +3. Il lavoro è pienamente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di eccellente livello (Q1).

12. B. Chiavarino, R.K. Sinha, M.E. Crestoni, **D. Corinti**, A. Filippi, C. Fraschetti, D. Scuderi, P. Maitre, S. Fornarini, Binding Motifs in the Naked Complexes of Target Amino Acids with an Excerpt of Antitumor Active Biomolecules: An Ion Vibrational Spectroscopy Assay, *Chem. – A Eur. J.* 27 (2021) 2348–2360.



In questo lavoro sono state analizzate le interazioni tra 5,7-dimetossi-4H-cromen-4-one, una porzione del glabrescione B (molecola a potenziale attività antitumorale) e gli amminoacidi istidina e lisina, i residui proteici che rivestono la cavità del presunto sito di legame del recettore. L'assegnazione strutturale si è basata sull'analisi comparativa dello spettro IRMPD e sugli spettri IR calcolati. Il lavoro è parzialmente congruente con il SSD CHIM/03, certamente attinente alle tematiche del bando ed è stato pubblicato su una rivista di ottimo livello (Q1).

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il candidato Davide Corinti si è applicato allo studio di sistemi di interesse bioinorganico e *metal-based drugs* mediante tecniche avanzate di spettrometria di massa, di spettroscopia vibrazionale ed elettronica (UV-vis), con l'utilizzo di calcoli quanto-meccanici a supporto delle tecniche sperimentali. Il candidato riporta nel suo CV 25 pubblicazioni, anche se non tutte congruenti con il SSD CHIM/03, ma attinenti alle tematiche del bando e comunque su riviste di elevata qualità (Q1 o Q2). Le 12 pubblicazioni presentate per la valutazione sono tutte pubblicate su riviste censite nella banca dati Journal of Citation Report; undici lavori sono stati pubblicati su riviste in fascia Q1 ed uno in fascia Q2. Da notare che il lavoro #6 ha ricevuto il Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018. Delle 12 pubblicazioni presentate, in 8 il candidato è primo autore ed in una è *corresponding author*. Molto buona è la collocazione editoriale della produzione presentata per la valutazione (IF medio = 8.4) e il loro interesse all'interno della comunità scientifica di riferimento (numero totale di citazioni = 171; indice di Hirsch = 8).

Valutazione della produzione complessiva

Dall'analisi complessiva dei lavori e dei titoli presentati si evidenzia che il candidato dimostra di aver acquisito non solo le capacità tecniche richieste nel bando del presente concorso (art. 2 del bando), ma anche competenza e autonomia, testimoniata dalle pubblicazioni a primo nome e come *corresponding author*. L'ottima esperienza scientifica e tecnologica che si evince dai titoli presentati è pienamente congruente con la linea di ricerca su cui il ricercatore dovrà applicarsi. Questa, unita all'attività didattica presentata, testimonia la competenza del candidato nelle discipline del SSD della presente procedura valutativa (Settore concorsuale 03-B1 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/03 – CHIMICA GENERALE ED INORGANICA).

GIUDIZIO COLLEGALE



TITOLI

1. DOTTORATO DI RICERCA (titolo Doctor Europaeus) in Scienze Farmaceutiche conseguito il 21/12/2018 con votazione ottimo con Lode presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (Tesi originale allegata).
2. Lettera di referenze della Prof.ssa Perdita Barran attestante le competenze acquisite nel periodo di 3 mesi passato nei laboratori dell'Università di Manchester (01/03/2017 – 31/05/2017).
3. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 02/01/2015 al 30/10/2015.
4. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2019 al 30/06/2020.
5. Titolarità di Assegno di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 01/07/2020.
6. Titolarità di Borsa di studio per Attività di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco di Sapienza – Università di Roma dal 03/12/2018 al 30/04/2019.
7. Titolarità di assegno per attività di tutorato per l'insegnamento di Chimica del corso di laurea triennale in Ingegneria Energetica presso il Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" per l'anno accademico 2019/2020.
8. Incarico di docenza per l'Insegnamento "Esercitazioni di Chimica Generale ed Inorganica" del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche di Sapienza – Università di Roma per gli anni accademici 2019/2020 e 2020/2021.
9. Incarico di docenza per l'Insegnamento di "Chimica Bioinorganica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila per gli anni accademici: 2018/2019, 2019/2020 e 2020/2021.
10. Partecipazione all'EU FT-ICR MS Short Course 4 presso Warwick, UK.
11. Partecipazione in qualità di membro del comitato organizzatore all'EU FT-ICR MS Short Course 3 tenutosi a Roma.
12. Partecipazione alla Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica per Dottorandi 2019 presso la sede centrale del CNR di Roma (RM).
13. Partecipazione all'EU FT-ICR MS End User School 1 presso Joensuu, Finlandia.



14. Partecipazione alla CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques tenutasi a Trieste (TS).
15. Partecipazione al XX Corso di Spettrometria di Massa presso la Certosa di Pontignano (SI).
16. Partecipazione alla I Scuola di Spettrometria di Massa in Ambito Farmaceutico presso Angelini S.P.A., S. Palomba (RM).
17. Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019 da parte della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana.
18. Premio IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018 per l'articolo "Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy".
19. Lake Louise Student Travel Awards a Novembre 2017 per poter presentare al XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada.
20. Best Poster Prize al XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa tenutosi a Roma (RM).
21. Best Poster Prize al XLII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino.
22. Partecipazione all'ACS Spring 2021, congresso in remoto, 5-16 aprile 2021. Presentazione orale dal titolo: "Cisplatin ligand substitution by aminoacids: structure and reactivity of isolated encounter complexes".
23. Inorganic Reaction Mechanisms Group meeting tenutosi in remoto, 7 luglio 2020. Presentazione orale dal titolo: "Reductive dissociation of bare Pt(IV) prodrugs produces elusive open-shell Pt(III) species".
24. ASMS Conference 2020 Reboot tenutasi in remoto, 1-12 giugno 2020. Presentazione di un poster dal titolo: "Dissociation of mass-isolated encounter complexes of platinum(IV) prodrugs and ascorbic acid elucidates details on their bioactivation".
25. XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica presso Bari (BA), 9-12 Settembre 2019. Presentazione orale dal titolo: "Reaching a new level of understanding of the bioinorganic chemistry of Pt drugs using MS-based techniques".
26. XXII International Mass Spectrometry Conference tenutasi a Firenze (FI), 26-31 agosto 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Elusive monofunctional adducts of cisplatin with natural aminoacids revealed by IRMPD spectroscopy and photofragmentation kinetics".
27. XXIV IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC24) presso Faro, Portogallo, 1-6 luglio 2018. Presentazione di un poster dal titolo: "Structural insights into non-covalent halide adducts with tyrosine and 3-nitrotyrosine using ion-spectroscopy".



28. XXX Annual Tandem Mass Spectrometry workshop presso Lake Louise, Alberta, Canada, 29 novembre– 2 dicembre 2017. Presentazione orale dal titolo: “MS coupled with IRMPD spectroscopy and fixed-wavelength kinetics to disclose isomeric mixtures of antitumor PtII-complexes with amino acids”.
29. XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana tenutosi a Paestum (SA), 10-14 settembre 2017. Presentazione di un poster dal titolo: “Structural characterization and reactivity of bare cis- and transplatin hydrolysis products”.
30. XX Congresso Nazionale di Spettrometria di Massa a Roma (RM), 6-8 settembre 2016. Presentazione orale dal titolo: “Exploring ligand substitution mechanisms at the molecular level with IRMPD/MS: the case of cisplatin”
e presentazione poster intitolato: “Distinction between Cyanidin 3-O-glucoside and Cyanidin 3-O-galactoside by mass spectrometry combined with IRMPD spectroscopy”.
31. 1st NatMedDay workshop presso Aboca, SanSepolcro (AR) 22-23 settembre 2015. Presentazione di un poster intitolato: “Probing Biomolecules of Nutritional Interest: IRMPD Spectroscopy of Bare Protonated Pantothenic Acid”.
32. Congresso Nazionale di Chimica Inorganica tenutosi a Camerino (MC), 9-12 settembre 2015. Presentazione di un poster dal titolo: “Cisplatin reactions with model biological ligands monitored by IR multiphoton dissociation spectroscopy”.
33. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2016.
34. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1800€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2017.
35. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 1 (1000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2018.
36. Assegnazione fondi per progetto Avvio alla Ricerca – Tipo 2 (2000€) da parte di Sapienza – Università di Roma nel 2020.
37. Assegnazione di BeamTime da parte dell’Advisory Committee del FELIX laboratory per lo svolgimento del progetto “Discrimination of isomeric flavanones based on IR ion spectroscopy” (FELIX-2021-01-11).

VALUTAZIONE DEI TITOLI

Il candidato Davide Corinti si è laureato in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche presso l’Università degli Studi di Roma La Sapienza nel 2014 con la votazione di



110/110 e lode discutendo la tesi dal titolo "Interazione tra cisplatino ed istidina: uno studio integrato sperimentale e teorico". Nella stessa sede ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche con la votazione di Eccellente con lode nel 2018, discutendo una tesi dal titolo "Exploiting MS-based techniques to unveil elusive reaction intermediates of bioinorganic relevance".

Durante il corso di dottorato il candidato ha studiato sistemi di interesse bioinorganico, inclusi i complessi di farmaci contenenti Pt(II) e Pt(IV) con leganti biologici (amino acidi, nucleobasi, composti modello) con particolare riguardo al meccanismo della loro formazione e alla loro caratterizzazione mediante tecniche avanzate di spettrometria di massa, di spettroscopia vibrazionale e VUV e di calcoli quanto-meccanici. Il candidato è stato studente di dottorato visitatore per tre mesi presso i laboratori della Prof. Perdita Barran, The University of Manchester (UK), lavorando allo sviluppo di una piattaforma sperimentale tra spettrometro di massa Waters MS Synapt G2-S ed un laser IR a colorante modulabile nell'ambito del progetto dal titolo: "Spettrometria di massa in combinazione con Ion Mobility e spettroscopia IRMPD per la risoluzione di miscele ioniche di interesse catalitico e biologico".

Nel 2015, 2019, 2020 e 2021 è stato titolare di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" svolgendo attività di ricerca pienamente inerente al SSD del concorso e a riconoscimento di un percorso di crescita scientifica. E' titolare di fondi di ricerca sovvenzionati dall'Ateneo Sapienza (n. 4 progetti di Avvio alla Ricerca). Nel 2021 il centro EU di spettroscopia laser FELIX laboratory (Radboud University, Nijmegen, Netherlands) ha accettato il suo progetto assegnandogli un periodo di Beam Time (6 giorni). Il candidato ha ricevuto riconoscimenti a livello nazionale ed internazionale, incluso il Premio Miglior Tesi di Dottorato in Chimica Inorganica 2019; ha partecipato a numerosi convegni nazionali e internazionali presentando 7 poster e 5 comunicazioni orali.

Dal 2018 svolge un'intensa attività didattica che testimonia la sua competenza nelle discipline del SSD del concorso, con incarichi di docenza presso il dipartimento di afferenza e il dip. Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria di Sapienza e il dip. di Scienze Fisiche e Chimiche dell'Università degli Studi dell'Aquila.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

1. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Binding to Biological Ligands Revealed at the Encounter Complex Level by IR Action Spectroscopy, *Chem. - A Eur. J.* 22 (2016) 3794–3803.



In questo studio il prodotto di idrolisi primaria del cisplatino, riconosciuta come la forma attiva del farmaco, è stato messo a reagire con leganti biologici sia in soluzione che in fase gassosa. Il complesso di incontro che risulta dall'interazione dell'acqua complesso con il legante coordinato esternamente è stato caratterizzato mediante spettrometria di massa tandem, spettroscopia vibrazionale di ioni in fase gassosa (IRMPD) e calcoli quanto-meccanici. Questa specie è un esempio di complesso di incontro del tipo Eigen-Wilkins postulata in reazioni di scambio di legante in soluzione acquosa. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

2. **D. Corinti**, A. De Petris, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M.E.

Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin Primary Complex with L-Histidine Target Revealed by IR Multiple Photon Dissociation (IRMPD) Spectroscopy, *ChemPhysChem*. 18 (2017) 318–325.

Le interazioni del cisplatino con le proteine sono responsabili di molti effetti tossici del farmaco. Tra i siti di attacco preferenziali c'è l'aminoacido istidina, il cui complesso di incontro primario con il cisplatino è stato identificato e caratterizzato mediante spettroscopia vibrazionale d'azione (IRMPD). È stata evidenziata la formazione in soluzione di specie isomere le cui quantità relative sono state stimate applicando cinetiche di fotodissociazione IRMPD a frequenze specifiche. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

3. R. Paciotti, **D. Corinti**, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C.

Coletti, N. Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. Elisa Crestoni, S. Fornarini, Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (2017) 26697–26707.

In questo lavoro i complessi di cis- e trans-platino con l'aminoacido metionina, uno dei siti preferenziali di attacco, sono stati preparati in soluzione e studiati in fase gassosa con spettrometria di massa tandem, spettroscopia IRMPD e calcoli quanto-meccanici allo scopo di una loro caratterizzazione strutturale a livello molecolare. I risultati hanno evidenziato l'attacco preferenziale del Pt(II) all'atomo di zolfo per l'isomero cis-platino e all'atomo di azoto del gruppo aminico per l'isomero trans-platino. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

4. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, S. Piccirillo, M. Giampà, M.E. Crestoni,

S. Fornarini, Hydrolysis of cis- and transplatin: structure and reactivity of the aqua complexes in a solvent free environment, *RSC Adv.* 7 (2017) 15877–15884.



Le specie mono e di-idratate sono intermedi chiave nel meccanismo d'azione antitumorale del cisplatino. In questo lavoro sono state ottenute a partire da cis e transplatino, isomero non attivo del farmaco e ne è stata studiata la reattività con nucleofili allo zolfo, all'azoto e all'ossigeno in fase gassosa mediante spettrometria di massa FT-ICR. I risultati hanno messo in evidenza una generale superiore velocità di sostituzione dei complessi mono-idratati. In aggiunta è stata caratterizzata mediante spettroscopia vibrazionale IRMPD la struttura dei complessi cis- e transplatino di-idratati. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

5. **D. Corinti**, B. Gregori, L. Guidoni, D. Scuderi, T.B. McMahon, B. Chiavarino, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Complexation of halide ions to tyrosine: role of non-covalent interactions evidenced by IRMPD spectroscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (2018) 4429–4441.

Gli addotti di ioni alogenuro (Cl^- , Br^- , I^-) con l'amino acido L-tirosina ed il suo derivato 3-nitrotirosina, un bio-marker della reazione di nitratura delle proteine, sono stati studiati con spettroscopia IRMPD nella regione di fingerprint e degli stretching X-H ($X = \text{N}, \text{O}$). L'analisi spettroscopica ha evidenziato il contributo di vari isomeri che si differenziano per vari modi di interazione alogeno-aminoacido. Il contributo degli isomeri in cui l'anione è legato al sito fenolico cresce con l'aumentare delle dimensioni dell'alogenuro, in accordo con una minore basicità dell'anione. Nei nitroderivati invece si osserva un attacco prevalente dell'anione all'anello aromatico depauperato di elettroni. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

6. **D. Corinti**, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maître, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Short lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy, *Int. J. Mass Spectrom.* 435 (2019) 7–17.

Lo studio del processo di sostituzione del cisplatino da parte di ammidi, urea e tiourea, scelti quali modelli di gruppi funzionali biologici, è l'obiettivo di questo studio. L'analisi spettrometrica di massa ha evidenziato la formazione di complessi formalmente penta-coordinati che sono stati selezionati e caratterizzati quali addotti non covalenti tra l'aqua-complesso del cisplatino ed i vari leganti selezionati facendo uso della spettroscopia vibrazionale IRMPD e di calcoli quanto-meccanici. Il lavoro è pubblicato su rivista di buon livello (Q2), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando. Questo lavoro è stato riconosciuto come "IJMS Best Fundamental Student Paper of 2018".



7. A. Theisen, R. Black, **D. Corinti**, J.M. Brown, B. Bellina, P.E. Barran, Initial Protein Unfolding Events in Ubiquitin, Cytochrome c and Myoglobin Are Revealed with the Use of 213 nm UVPD Coupled to IM-MS, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 30 (2019) 24–33.

In questo lavoro sono stati messi in evidenza gli eventi iniziali di unfolding di alcune proteine di riferimento (ubiquitina, citocromo c e mioglobina) mediante processi di fotodissociazione con fotoni UV a 213 nm. Tale luce è stata introdotta nella regione strumentale che precede la separazione delle specie ioniche proteiche tramite ion mobility (IM); in tal modo si è reso possibile caratterizzare i siti delle proteine principalmente implicati nel processo di unfolding. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

8. **D. Corinti**, A. Maccelli, B. Chiavarino, P. Maitre, D. Scuderi, E. Bodo, S. Fornarini, M.E. Crestoni, Vibrational signatures of curcumin's chelation in copper(II) complexes: An appraisal by IRMPD spectroscopy, *J. Chem. Phys.* 150 (2019) 165101.

L'effetto protettivo del polifenolo naturale curcumina contro danni ossidativi è largamente ascrivibile al suo effetto di chelazione di metalli di transizione redox-attivi. Questo studio descrive l'effetto della protonazione e della coordinazione con Cu(II) sulle caratteristiche strutturali ed energetiche della curcumina, applicando un approccio combinato basato su spettrometria di massa tandem, spettroscopia vibrazionale IRMPD e calcoli quanto-meccanici. I risultati evidenziano che il complesso metallico origina una struttura planare ed altamente simmetrica derivante dall'interazione con i due ossigeni della funzionalità syn-enolato, mentre la specie protonata esiste nelle differenti forme isomeriche cheto-enolica e dichetonica. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

9. P. Maitre, D. Scuderi, **D. Corinti**, B. Chiavarino, M.E. Crestoni, S. Fornarini, Applications of Infrared Multiple Photon Dissociation (IRMPD) to the Detection of Posttranslational Modifications, *Chem. Rev.* 120 (2020) 3261–3295.

Questa review descrive le applicazioni della spettroscopia vibrazionale ionica IRMPD per l'identificazione e la localizzazione di modifiche post-traduzionali (PTM) in aminoacidi, peptidi e proteine. Le PTM riportate includono la solfonazione, fosforilazione, ossidazione, nitrosazione, nitrificazione e metilazione, rivelate grazie a processi di frammentazione selettiva a specifiche lunghezze d'onda. Tale approccio emerge come un settore in crescente sviluppo che può essere di complemento a tecniche di riconoscimento convenzionali, fornendo informazioni strutturalmente diagnostiche nell'analisi di peptidi e proteine.



Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

10. **D. Corinti**, M.E. Crestoni, S. Fornarini, E. Dabbish, E. Sicilia, E.

Gabano, E. Perin, D. Osella, A multimethodological inquiry of the behavior of cisplatin-based Pt(IV) derivatives in the presence of bioreductants with a focus on the isolated encounter complexes, *JBIC J. Biol. Inorg. Chem.* 25 (2020) 655–670.

Questo lavoro si avvale di un approccio combinato basato su spettroscopia NMR, IRMPD, spettrometria di massa e calcoli quanto-meccanici per lo studio del meccanismo di riduzione con rilascio di Pt(II) da complessi di Pt(IV) con diversi gruppi assiali in presenza di agenti riducenti quale l'acido ascorbico.

Il comportamento dei complessi ionici di incontro ottenuti con ionizzazione ESI è stato descritto a livello molecolare mettendo in risalto l'importanza dei leganti idrossido legati al Pt(IV) per l'attivazione del processo di riduzione. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

11. **D. Corinti**, G. Frison, B. Chiavarino, E. Gabano, D. Osella, M.E.

Crestoni, S. Fornarini, Can an Elusive Platinum(III) Oxidation State be Exposed in an Isolated Complex?, *Angew. Chemie Int. Ed.* 59 (2020) 15595–15598.

In questo lavoro è descritta la formazione mediante CID (collision induced dissociation) di specie ridotte in cui Pt adotta uno stato di ossidazione formale pari a +3 a partire da profarmaci deprotonati contenenti complessi di Pt(IV). Tali specie sono elusive e potrebbero formarsi en route nei processi di riduzione cellulare di composti di Pt(IV) alla forma attiva contenente Pt(II). In questo studio, la localizzazione del radicale sia sull'atomo metallico che sul gruppo NH₂, che agisce da legante non-innocente, è dimostrata mediante spettroscopia IRMPD e calcoli a livello DFT, MP2 e CCSD. Questa ricerca evidenzia uno dei pochi esempi in cui la specie elusiva Pt(III) è identificata come intermedio stabile. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

12. B. Chiavarino, R.K. Sinha, M.E. Crestoni, **D. Corinti**, A. Filippi, C.

Fraschetti, D. Scuderi, P. Maitre, S. Fornarini, Binding Motifs in the Naked Complexes of Target Amino Acids with an Excerpt of Antitumor Active Biomolecules: An Ion Vibrational Spectroscopy Assay, *Chem. – A Eur. J.* 27 (2021) 2348–2360.

In questa ricerca viene descritta la natura delle interazioni tra una porzione di glabrescione B (cromone), una piccola molecola naturale a potenziale attività



antitumorale, con due aminoacidi (istidina e lisina) scelti quali modello di residui proteici che rivestono il sito attivo del recettore bersaglio. Gli spettri vibrazionali IRMPD evidenziano le proprietà di potente accettore di legame H da parte del gruppo carbonilico del cromone nei complessi non covalenti selezionati. Il lavoro è pubblicato su rivista di ottimo livello (Q1), congruente con il SSD-CHIM/03 e attinente alle tematiche del bando.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

Il Candidato Davide Corinti presenta alla valutazione una produzione complessiva pari a 12 pubblicazioni, in 8 è primo autore e in 1 è corresponding author, censite sulla banca dati SCOPUS con un rank JCR ottimo (11/12 in Q1, 1/12 in Q2).

Valutazione della produzione complessiva

L'attività di ricerca svolta durante la tesi di laurea, il corso di dottorato e le ricerche svolte durante gli assegni di ricerca sono pienamente congruenti con il SSD CHIM03.

I lavori presentati dimostrano che il Candidato ha acquisito notevole esperienza e maturità in ambiti di ricerca inerenti le tematiche richieste dal presente concorso. Il livello della produzione scientifica è valutabile molto il profilo curriculare del candidato risulta ottimo.

La Commissione termina i lavori alle ore 16:30.

Letto, approvato e sottoscritto.
Roma, 12 novembre 2021

La Commissione

Prof. Nazzareno Re- Presidente

Prof. Mauro Ravera – Componente

Prof.ssa Maria Elisa Crestoni- Segretario