

**PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA A N. 1 POSTO/I DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO TIPOLOGIA B INDETTA CON D.R N. 1828/2018 DEL 12/07/2018 PER IL SSD CHIM/02 – SC 03/A2 – PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITA' DI ROMA LA SAPIENZA.**

**VERBALE N. 3**

Alle ore 14.30 del giorno 14 dicembre 2018 si è riunita in modalità telematica la Commissione giudicatrice per la Procedura selettiva di chiamata a n. 1 posto/i di ricercatore a tempo determinato SC 03/A2- ssd CHIM/02, nominata con D.R. n. 2441/2018 del 12.10.2018 nelle persone di:

- Prof. Francesco PAOLUCCI – Professore Ordinario – Università degli Studi di Bologna (Presidente);
- Prof. Giuseppe GRAZIANO – Professore Ordinario – Università degli Studi del Sannio di Benevento (Componente);
- Prof.ssa Simona Olga BINETTI – Professore Associato – Università degli Studi di Milano-Bicocca (Segretario).

Tutti i componenti della Commissione sono collegati in modalità telematica mediante connessione Skype.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 14.30

La Commissione, presa visione dell'elenco dei candidati e delle rinunce sino ad ora pervenute prende atto che i candidati da valutare ai fini del concorso sono n. 5, e precisamente:

- GONTRANI Lorenzo;
- MANCINI Giordano;
- MELONI Simone;
- MIGLIORATI Valentina;
- NAVARRA Maria Assunta.

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

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

Secondo quanto riportato nel Bando di indizione della procedura (Articolo 5 – Adempimenti della Commissione), essendo il numero dei candidati inferiore a 6, tutti i candidati sono ammessi alla fase successiva, non viene eseguita valutazione preliminare e la Commissione redige una relazione contenente: a) profilo curriculare di ciascun candidato; b) breve valutazione collegiale del profilo, anche in relazione alla linea di ricerca e ad eventuali altri requisiti stabiliti dal Bando, e valutazione scientometrica complessiva; c) discussione collegiale su profilo e produzione scientifica e selezione anche a maggioranza degli ammessi alle successive fasi concorsuali.

Si procede quindi all'esame dei titoli e delle pubblicazioni ai fini della formulazione del giudizio collegiale espresso dalla Commissione, allegato al presente verbale quale sua parte integrante (all. C).

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

- GONTRANI Lorenzo;
- MANCINI Giordano;

- MELONI Simone;
- MIGLIORATI Valentina;
- NAVARRA Maria Assunta.

Tutti i candidati sono convocati per il colloquio il giorno 14 gennaio 2019, alle ore 11.00, presso il Dipartimento di Chimica

La Commissione viene sciolta alle ore 18.00 e si riconvoca per lo svolgimento del colloquio il giorno 14 gennaio 2019 alle ore 11.00.

Letto approvato e sottoscritto seduta stante.

La Commissione

- Prof. \_\_\_\_\_

- Prof. \_\_\_\_\_

- Prof. \_\_\_\_\_

### ALLEGATO C AL VERBALE N.3

#### **PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA A N. 1 POSTO/I DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO TIPOLOGIA B INDETTA CON D.R N. 1828/2018 DEL 12/07/2018 PER IL SSD CHIM/02 – SC 03/A2 – PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITA' DI ROMA LA SAPIENZA.**

L'anno 2018, il giorno 14 del mese di dicembre, si è riunita in modalità telematica la Commissione giudicatrice della procedura selettiva di chiamata per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato di tipologia B per il Settore concorsuale 03/A2 – Settore scientifico-disciplinare CHIM/02 - presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.R. n. 2441/2018 del 12.10.2018 e composta da:

- Prof. Francesco PAOLUCCI – Professore Ordinario – Università degli Studi di Bologna (Presidente);
- Prof. Giuseppe GRAZIANO – Professore Ordinario – Università degli Studi del Sannio di Benevento (Componente);
- Prof.ssa Simona Olga BINETTI – Professore Associato – Università degli Studi di Milano-Bicocca (Segretario).

Tutti i componenti della Commissione sono collegati in modalità telematica mediante connessione Skype.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 14.30 e, secondo quanto riportato nel bando, procede ad elaborare il profilo curricolare di ciascun candidato, una breve valutazione collegiale del profilo, anche in relazione alla linea di ricerca e ad eventuali altri requisiti stabiliti dal Bando, e valutazione scientometrica complessiva, e la discussione collegiale su profilo e produzione scientifica.

#### **CANDIDATO: GONTRANI Lorenzo**

##### **PROFILO CURRICOLARE DEL CANDIDATO**

Lorenzo Gontrani si laurea in Chimica nel 1998 con 110/110 e lode svolgendo una tesi dal titolo "Studio delle interazioni molecola-molecola e molecola-solvente mediante diffrazione a raggi X, spettroscopia infrarossa e calcolo quantomeccanico". Nel 2002 consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Pisa con una tesi dal titolo "Studio delle proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico con metodi teorico-computazionali".

Da ottobre 2002 a giugno 2006 è stato Ricercatore B2 – CCNL presso Colosseum Combinatorial Chemistry Centre for Technology (C4T) – Università di Roma - "Tor Vergata". Da giugno 2006 a novembre 2007 è stato Borsista presso C. A. S. P. U. R. - Centro di Supercalcolo Per Università e Ricerca. Da dicembre 2007 a marzo 2009 è stato Assegnista di Ricerca presso Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università di Cagliari. Da luglio 2009 a giugno 2010 è stato Assegnista di Ricerca presso il Dipartimento di Scienze della Terra, Università di Roma "La Sapienza". Da maggio 2011 ad aprile 2014 è stato Ricercatore Tempo Determinato presso CNR-Istituto di Struttura della Materia, Tor Vergata. Da maggio 2014 a gennaio 2018 è stato Assegnista di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza". Dal Gennaio 2018 è Assegnista di Ricerca presso Dipartimento di Chimica, "G. Ciamician", Università di Bologna. Dal 2011 al 2018 ha svolto cicli di seminari di chimica computazionale e interpretazioni di dati diffattometrici all'interno del corso "Chimica Fisica III" – Chimica Industriale – ed esercitazioni frontali al calcolatore per gruppi di uno/due studenti, presso il Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza". Dal 2010 al 2018 è stato "assistente" nella supervisione di tesi di laurea triennale (12), magistrale (6), dottorati di ricerca (6). Nel 2002 ha svolto lezioni di chimica computazionale nell'ambito di Corsi di formazione per il progetto MIUR N°Art11 Legge 451/94.

Risulta “partecipante” ai seguenti progetti: 1) PRACE TIER0 “Amino-acid anions in organic compounds: charting the boundary of room temperature Ionic Liquids” (ore di calcolo), nel 2014; 2) PRACE TIER0 “Ab initio molecular dynamics of lanthanides in protic ionic liquids” (ore di calcolo), nel 2013; 3) Progetto Awards “Preparation and structural, dynamical and thermodynamical characterization of ionic liquids obtained from natural sources. Study of the interactions between natural ionic liquids and thermosensitive polymers”, nel 2013; 4) FIRB “Structure and dynamics of ionic liquids”, nel periodo 2011-2014; 5) Progetto Ateneo “Sintesi e caratterizzazione di nuovi liquidi ionici chirali”, nel 2011; 6) Progetto Ateneo “Protic ionic liquids: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques”, nel 2010; 7) PRIN “Struttura e Dinamica di Liquidi Ionici e loro miscele”, nel periodo 2008-2009; 8) Progetto Ateneo “Studio delle proprietà e caratterizzazione di molecole organiche mediante diffrazione di raggi x e calcoli teorici”, nel 2007; 9) Progetto MIUR (MURST) “Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa”, nel periodo 2002-2006.

Risulta “referente principale” per i seguenti progetti: 1) CH-5455 “Proton transfer in alkylammonium-based ionic liquids binary mixtures” – ESRF Synchrotron, Grenoble, Francia (6 beamtime shifts), nel 2018; 2) Modeling of ionic liquids containing WCA: std12-011 (100000 ore di calcolo), nel 2012; 3) Protic Ionic Liquids: std11- 465 (90000 ore di calcolo), nel 2011; 4) Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids std10-181 (90000 ore di calcolo), nel 2010; 5) Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids std09-320 (90000 ore di calcolo), nel 2009.

Svolge due periodi di permanenza all'estero presso strutture di ricerca: nel giugno 2018 presso il Laboratorio QUILL, Queen’s University of Belfast, Belfast (Irlanda del Nord, UK) in collaborazione con la Dott.ssa Natalia Plechkova, per caratterizzazioni chimico fisiche di Deep Eutectic Solvents (DES); nel dicembre 2009 presso il “Laboratoire de Thermodynamique des Solutions et des Polymères” – Université Blaise Pascal (Aubière-Clermont-Ferrand) per lo sviluppo di metodiche per costruire campi di forze per simulazioni classiche di liquidi ionici, in collaborazione con il Prof. Agilio Padua.

Come autore principale/presentatore partecipa a 14 convegni nazionali o internazionali con contributi poster e/o orali. Nel 2017 è relatore su invito ad un workshop organizzato dal Centro di ricerca CNIS, Università di Roma La Sapienza. Frequenta diversi corsi, congressi, workshop. Dal 2015 è membro della Società Chimica Italiana – Divisione Chimica Fisica e Teorica/Computazionale.

È revisore di articoli scientifici per diverse riviste internazionali. E’ co-autore di un capitolo di libro e co-editor di un libro .

Presenta n.5 attestati/dichiarazioni dell’attività svolta presso istituzioni nazionali o estere. Allega n.2 lettere di presentazione, rilasciate dal Prof. Ramondo dell’Università degli Studi dell’Aquila e dalla Dott.ssa Mocchi dell’Università di Cagliari, entrambe datate marzo 2018.

E’ in possesso di abilitazione scientifica nazionale (ASN) nel seguente settore concorsuale: 03/A2 “Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche”, seconda fascia (tornate 2013 e 2016).

Il Candidato dichiara di essere in possesso dei seguenti indicatori (basati su dati ISI/scopus)

- numero totale pubblicazioni = 76
- numero totale delle citazioni = 1600;
- numero medio di citazioni per pubblicazione = 21,05;
- indice di Hirsch = 22;
- Impact Factor totale = 229,21
- Impact Factor Medio per pubblicazione = 3,02
- H-INDEX corretto per l’età accademica = 1,43 (Il candidato calcola tale indice per un’età accademica pari a 14,92, cioè non considerando i 4 anni passati nel centro di ricerca C4T).

#### VALUTAZIONE E DISCUSSIONE COLLEGALE SU PROFILO E PRODUZIONE SCIENTIFICA DEL CANDIDATO

Il candidato presenta un profilo scientifico attinente il settore concorsuale 03/A2, SSD CHIM/02. Il campo di ricerca è principalmente legato allo studio della struttura di sistemi liquidi con metodi teorico/computazionali e diffrattometrici non convenzionali (diffrazione di raggi X in dispersione di energia).

La tesi di dottorato del candidato ha riguardato le proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico.

Attualmente è assegnista, nel SSD CHIM/02, presso il Dipartimento di Chimica G. Ciamician dell'Università di Bologna. Precedentemente è stato assegnista presso altri atenei italiani (Sapienza e Cagliari), borsista presso il CASPUR e ricercatore presso CNR e il centro C4T, alternando due brevi periodi di formazione e ricerca all'estero adeguatamente documentati.

Il candidato ha svolto a livello accademico un'attività didattica limitata, che comprende seminari ed esercitazioni, nell'ambito di corsi d'insegnamento del SSD CHIM/02, e tutoraggio ("assistenza") nella supervisione di tesi di laurea e dottorati di ricerca.

Il candidato ha partecipato a progetti nazionali, nell'ambito dei programmi FIRB e PRIN, e di Ateneo, relativi allo studio delle proprietà strutturali dei liquidi ionici. A livello europeo ha partecipato a progetti per il finanziamento di ore di calcolo. E' stato responsabile di 4 progetti per il finanziamento di *core hours* presso il CASPUR e di *beamtime* presso ESRF Synchrotron. Non risulta partecipante a progetti collaborativi finanziati dalla comunità europea (e.g. FP 6<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> o H2020).

La divulgazione scientifica della propria ricerca è caratterizzata da una discreta attività di presentazione a convegni internazionali e nazionali, con 7 contributi orali, di cui 1 relazione su invito nell'ambito di un workshop del centro CNIS di Sapienza Università di Roma. Le due lettere di referenza presentate, scritte da esperti italiani, testimoniano un buon riconoscimento a livello nazionale.

Le 76 pubblicazioni Scopus, sono di livello ottimo (IF medio per pubblicazione 3,0). Le pubblicazioni risultano congruenti con il settore scientifico disciplinare CHIM02. Si estendono su un intervallo temporale a partire dal 1999 e si distribuiscono piuttosto omogeneamente ad eccezione dei primi anni (nessuna pubblicazione nel periodo 2002-2005, in cui il candidato dichiara di esser stato ricercatore presso istituto che imponeva vincoli nella divulgazione dei risultati), con H-index 22 e una media di circa 21 citazioni per pubblicazione.

Il curriculum del candidato non riporta il conseguimento di premi nazionali o internazionali per attività di ricerca.

Presenta attività di referaggio per riviste internazionali ed è stato *co-editor* di un libro della Springer sulla struttura dei liquidi ionici.

E' iscritto alla società chimica italiana, come afferente alla divisione di Chimica Fisica e Chimica Teorica e Computazionale.

Non presenta titolarità di brevetti né altra attività di trasferimento tecnologico.

Il profilo curricolare del candidato non è attinente con le attività di ricerca previste dal bando di concorso.

Il candidato è in possesso di Abilitazione Scientifica Nazionale nel settore concorsuale oggetto del bando nel ruolo di seconda fascia (ottenuta nella tornate 2013 e 2016).

**Giudizio: ottimo**

Per quanto attiene le 20 pubblicazioni allegare e sottoposte a valutazione, il candidato dimostra un apporto individuale di grande rilievo, risultando *corresponding author* in tutte le pubblicazioni, primo autore in 6 ed ultimo autore in 7. 17 pubblicazioni rientrano nel I quartile (Q1), 3 nel secondo (Q2). Le 20 pubblicazioni hanno impact factor medio pari a 3,2 riferito all'anno di pubblicazione e numero medio di citazioni per pubblicazione pari a 9,5 (Scopus). Tutte le 20 pubblicazioni si riferiscono allo studio computazionale, supportato da indagini diffrattometriche e spettroscopiche, delle proprietà fisiche dei sistemi liquidi. Nessuna, delle 20 pubblicazioni, è direttamente riconducibile allo studio di materiali per l'accumulo e la conversione elettrochimica dell'energia.

**Giudizio: ottimo**

**CANDIDATO: MANCINI Giordano**

**PROFILO CURRICOLARE DEL CANDIDATO**

Giordano Mancini si laurea in Chimica nel 2004 con 110/110 e lode svolgendo una tesi dal titolo "Simulazione di sistemi molecolari tramite metodi classici e quantomeccanici; spettroscopia di assorbimento di raggi X". Nel 2008 consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Chimica presso l'Università di Roma La Sapienza con una tesi dal titolo "A combined computational and XAS approach to the study of structural and dynamical properties of electrolytic aqueous solutions". Nel

2012 consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Genetica e Biologia Cellulare presso l'Università della Tuscia con una tesi dal titolo "Second Generation Sequencing tools: from de novo genome assembly to quantitative genetics studied by dense SNP chips". Nel periodo 2013-2017 partecipa a tre corsi online e ad una scuola post-dottorato.

Da ottobre 2005 a novembre 2007 è stato titolare di Borsa di Studio presso il Consorzio Applicazioni di Supercalcolo per Università e Ricerca (CASPUR), occupandosi di sviluppo di software per applicazioni di Chimica computazionale e gestione di cluster Linux e sistemi HPC. Da novembre 2007 a novembre 2008 è stato Assegnista di Ricerca presso l'Istituto di metodologie Inorganiche e Plasmi (IMIP) CNR di Bari, occupandosi di studi computazionali di adsorbimento di O<sub>2</sub> su superfici inorganiche. Da dicembre 2008 a gennaio 2009 ha fornito una prestazione occasionale presso il Consorzio Applicazioni di Supercalcolo per Università e Ricerca (CASPUR) per lo sviluppo software per applicazioni in ambito chimico - biomedico. Nel gennaio 2012 è stato titolare di Co.Co.Co presso l'Università degli Studi di Bari per la creazione di un database per applicazioni di trascrittomica ed ha fornito una prestazione occasionale presso il Consorzio Applicazioni di Supercalcolo per Università e Ricerca (CASPUR). Nel periodo febbraio 2012-gennaio 2013 è Assegnista di Ricerca presso Scuola Normale Superiore di Pisa - Classe di Scienze per lo Sviluppo di algoritmi innovativi per simulazioni di Dinamica Molecolare Classica. Da marzo 2013 a dicembre 2017 è stato Ricercatore Tempo Determinato – tipologia A presso la Scuola Normale Superiore di Pisa- Classe di Scienze su attività di ricerca Scientifica di base in Chimica Teorica e Computazionale, sviluppo di algoritmi e codice scientifico e gestione degli apparati di calcolo del Laboratorio SMART. Nel 2016 ha svolto il ruolo di CECAM Node Director presso la Scuola Normale Superiore di Pisa. Dal 2017 è Chief Operating Officer allo SMART Lab presso la Scuola Normale Superiore di Pisa.

E' stato titolare dei corsi "Laboratorio Virtuale di Chimica" e "Scientific Computing" negli A.A. 2015/2016 e 2016/2017 presso la Scuola Normale Superiore di Pisa. Ha svolto lezioni dell'ambito della biologia computazionale. Ha partecipato (come membro o presidente) a commissioni per l'acquisizione di strumentazione scientifica (sistemi HPC), valutazioni di candidati per assegni di ricerca e per personale TA. E' stato Co-relatore di Lauree triennali e di Dottorato.

Risulta "referente principale" per i seguenti progetti: 1) Progetto di Ateneo per giovani ricercatori "In silico design of a new fluorescent molecular rotor weakly sensitive to environmental polarity" – Scuola Normale Superiore di Pisa (€ 10000), nel 2012-2013; 2) Finanziamento a supporto della ricerca di base "Immersive Virtual Reality Environments for molecular modeling" - Scuola Normale Superiore di Pisa (€ 4000), nel 2017; 3) NVIDIA GPU Seeding program "Conformational search methods on GPUs" (\$ 1.200,00), nel 2017. E' inoltre responsabile di unità nel progetto FIRB 2012 "Nanotubi di argilla per la progettazione di materiali intelligenti ecosostenibili" nel 2013-2016.

Svolge tre periodi di "visiting scientist": 26 maggio - 7 giugno 2017 presso Gaussian Inc., società di ricerca privata; 15 ottobre - 31 ottobre 2016 presso la National University of Singapore per lo sviluppo di campi di forze per simulazione classiche; nel 2014 presso la Computational Biochemistry University of Porto.

Nel periodo 2004-2015 ha partecipato a 6 sessioni di misura per esperimenti XAS (EXAFS/XANES) con luce di sincrotrone presso ESRF (Grenoble, Francia) ed Elettra (Trieste).

E' membro del comitato organizzatore e/o scientifico di n.3 convegni nazionali o internazionali. E' relatore su invito al IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana.

Dal 2007 è membro della Società Chimica Italiana – Divisione di Chimica Fisica e poi di Chimica Teorica e Computazionale.

È revisore di articoli scientifici per alcune riviste internazionali. Ha contribuito alla pubblicazione di n.2 libri.

Allega n.3 lettere di presentazione, rilasciate dal Prof. Legname della SISSA di Trieste, dal Prof. Sousa Cerqueira dell'Università di Porto e dal Dott. Riccardo Spezia del CRCN-CNRS di Parigi, tutte datate maggio 2018.

E' in possesso di abilitazione scientifica nazionale (ASN) nei seguenti settori concorsuali: i) 03/A2 "Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche", seconda fascia (bando DD 1532/2016); ii) 03/B1 "Fondamenti delle Scienze Chimiche e dei Sistemi Inorganici", seconda fascia (bando DD 1532/2016).

Il Candidato dichiara di essere in possesso dei seguenti indicatori:

- numero totale pubblicazioni = 62 (60 articoli scientifici e 2 libri, Scopus – WOS)
- numero totale delle citazioni = 803;
- numero medio di citazioni per pubblicazione = 13,38;
- indice di Hirsch = 17;
- Impact Factor totale = 208,48
- Impact Factor Medio per pubblicazione = 3,47
- H-INDEX corretto per l'età accademica = 1,31.

### VALUTAZIONE E DISCUSSIONE COLLEGIALE SU PROFILO E PRODUZIONE SCIENTIFICA DEL CANDIDATO

Il candidato presenta un profilo scientifico attinente il settore concorsuale 03/A2, SSD CHIM/02. Il campo di ricerca è principalmente legato allo studio di sistemi liquidi e disordinati e metallo-proteine tramite modelli teorici e spettroscopia dei raggi-x.

La tesi di dottorato in Scienze Chimiche è congruente con il quadro di riferimento sopraindicato, mentre la tesi di dottorato in Genetica e Biologia Cellulare risulta solo parzialmente affine alle tematiche proprie della chimica-fisica.

Attualmente è dipendente della Scuola Normale Superiore di Pisa, nel ruolo di Chief Operating Officer inquadrato come Personale tecnico amministrativo presso il Laboratorio Strategie Multidisciplinari Applicate alla Ricerca e alla Tecnologia – SMART. Precedentemente è stato assegnista e ricercatore tempo determinato, tipologia A (SSD CHIM/02), presso lo stesso ateneo, borsista e collaboratore presso il CASPUR e l'Università degli Studi di Bari, assegnista presso il CNR-IMIP, alternando brevi periodi di formazione e ricerca all'estero (non adeguatamente documentati), sempre nell'ambito della chimica computazionale.

Il candidato ha svolto a livello accademico attività didattica limitata a due corsi d'insegnamento relativi alla chimica computazionale e lezioni nell'ambito della biologia computazionale. Ha fatto parte di commissioni per l'acquisizione di strumentazione scientifica, per la valutazione di candidati per assegni di ricerca e per personale TA. E' stato Co-relatore di Lauree triennali e di Dottorato (non meglio specificate).

Come responsabile ottiene piccoli finanziamenti dalla Scuola Normale Superiore di Pisa e da NVIDIA (GPU Seeding program). Partecipa a sessioni di misura per esperimenti con luce di sincrotrone presso ESRF (Grenoble, Francia) ed Elettra (Trieste). Non risulta partecipante a progetti collaborativi finanziati dalla comunità europea (e.g. FP 6<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> o H2020).

La divulgazione scientifica della propria ricerca è caratterizzata da una scarsa attività di presentazione a convegni, che risulta da un'unica relazione su invito nell'ambito del Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana. Risulta altresì membro del comitato organizzatore e/o scientifico di tre convegni nazionali o internazionali. Le tre lettere di referenza presentate, scritte da esperti italiani e stranieri, testimoniano un buon riconoscimento delle attività svolte dal candidato a livello nazionale ed interazionale. Le 62 pubblicazioni Scopus, dichiarate dal candidato, sono di ottimo livello (IF medio per pubblicazione 3,5). La gran parte delle pubblicazioni risulta congruente con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02; alcune pubblicazioni sono invece multidisciplinari o riconducibili specificamente al settore della fisica e della chimica inorganica. Si estendono su un intervallo temporale a partire dal 2005 e si distribuiscono piuttosto omogeneamente ad eccezione dei primissimi anni (nessuna pubblicazione nel 2006), con H-index 17 e una media di circa 13 citazioni per pubblicazione.

Il curriculum del candidato non riporta il conseguimento di premi nazionali o internazionali per attività di ricerca.

Presenta attività di referaggio per riviste internazionali. Non riporta documentata attività editoriale ma ha partecipato alla pubblicazione di due libri, senza specificare il proprio contributo.

E' iscritto alla Società Chimica Italiana, come afferente alla divisione di Chimica Fisica e Chimica Teorica e Computazionale.

Non presenta titolarità di brevetti né altra attività di trasferimento tecnologico.

Il profilo curricolare del candidato non riguarda le attività di ricerca previste dal bando di concorso.

Il candidato è in possesso di Abilitazione Scientifica Nazionale nel settore concorsuale oggetto del bando nel ruolo di seconda fascia (ottenuta nella tornata 2016).

**Giudizio: molto buono**

Per quanto attiene le 20 pubblicazioni allegare e sottoposte a valutazione, il candidato dimostra un significativo apporto individuale, risultando *corresponding author* in 7 pubblicazioni e primo autore in 5 (in nessuna pubblicazione risulta ultimo autore). 17 pubblicazioni rientrano nel I quartile (Q1), 3 nel secondo (Q2). Le 20 pubblicazioni hanno impact factor medio pari a 3,8 riferito all'anno del bando di concorso (numero di citazioni alla data di presentazione della domanda non dichiarato). Tutte le 20 pubblicazioni si riferiscono a studi delle proprietà strutturali di liquidi, soluzioni e sistemi d'interesse biologico, attraverso modelli teorici. Nessuna, delle 20 pubblicazioni, è direttamente riconducibile allo studio di materiali per l'accumulo e la conversione elettrochimica dell'energia.

**Giudizio: ottimo**

## **CANDIDATO: MELONI Simone**

### **PROFILO CURRICULARE DEL CANDIDATO**

Simone Meloni si laurea in Chimica nel 1997 con 110/110 e lode. Nel 2000 consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Roma La Sapienza .

Dal marzo 1999 al febbraio 2000 è stato Visiting PhD student presso Max-Planck-Institut Für Festkörperforschung, Stuttgart (GE). Nel periodo gennaio-marzo 2001 è stato Visiting Research Fellow presso Princeton University, Princeton (NJ, USA). Da marzo a dicembre 2001 ha una borsa di studio presso il Consorzio per le Applicazioni del Supercalcolo per Università e Ricerca – CASPUR Supercomputing Centre e ne diventa permanent staff, come leader dell'unità di Meccanica Statistica e Materiali, dal 2002 al 2013. Da settembre 2009 a ottobre 2012 è stato Postdoctoral e Marie-Curie Research Fellow presso University College Dublin (IE). Dal novembre 2013 a dicembre 2015 è stato Postdoctoral Research Fellow presso École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH). Nel periodo gennaio-novembre 2016 è assegnista di ricerca presso l'Università di Roma "La Sapienza". Dal 1° dicembre 2016 è Ricercatore Tempo Determinato – tipologia A presso l'Università di Roma "La Sapienza".

Dal 2016 tiene l'insegnamento di "Laboratorio di simulazioni atomistiche e microfluidiche" (4 CFU), Laurea Magistrale in Ingegneria delle Nanotecnologie, Università di Roma "La Sapienza". Negli A.A. 2014/15 e 2015/16 ha tenuto il corso "Introduzione alla Bioinformatica" (6 crediti – 40 ore) per la Scuola di Dottorato in Chimica, Università di Roma "La Sapienza". Nel 2014 ha svolto un corso monografico di 3 ore e 24 ore di tutoraggio per il corso "Advanced Computational Methods" presso École Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH). Un altro corso monografico di 3 ore è stato tenuto nello stesso anno presso University of Duisburg-Essen (GE). Ha tenuto un corso dottorale di 6 ore per Sapienza Università di Roma e Roma Tre (2013, 2007-2009) e per University College Dublin (IE). Nel 2007-2009 ha svolto il corso "Molecular Simulation" (6 ore) presso Sapienza Università di Roma per Erasmus Mundus. Nel 2006-2009 e 2001 ha tenuto un corso di 24 ore presso "CASPUR Summer School of Advanced Computing".

Il candidato dichiara di aver coordinato o supervisionato 17 collaboratori di livello postdottorale o superiore e/o studenti di livello dottorale, nell'arco temporale 2003-2018 ricoprendo ruoli diversi, presso CASPUR, University College Dublin e Università di Roma "La Sapienza".

Dal 2018 ha il titolo di Visiting Scientist del Daresbury Laboratory - Science and Technology Facility Council (STFC), UK. Nel 2012 ottiene il premio "Ireland's Champions of EU research". Nel 2018 due lavori del candidato risultano selezionati come ESI "Highly Cited Paper" di Web of Knowledge ed uno come "Highlights 2017" del Journal of Physics: Condensed Matter.

Dal 2017 è membro del Consiglio d'area della Laurea Magistrale in Ingegneria delle nanotecnologie e della Commissione per la Gestione della Comunicazione e per l'Orientamento presso "Sapienza" University of Rome. Dal 2012 è Membro del Collegio dei Docenti della Scuola Dottorale in Meccanica Teorica e Applicata dell'Università di Roma "Sapienza".

Nel 2014-2015 è stato membro della Swiss Chemical Society.

Ha partecipato a 4 progetti per il finanziamento di *ore core* nell'ambito del programma EU-PRACE (2013-2017). Nel 2015 ha partecipato ad un progetto per l'acquisto di un cluster di calcolo per il Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, finanziato da Swiss Science National Foundation R'Equip. Ha partecipato a due progetti finanziati da Swiss National Science Foundation NCCR Programme: progetto "MARVEL: Computational Design and Discovery of Novel Materials" (2014-2015) e progetto "MUST: Molecular Ultrafast Science and Technology" (2013-2014). Nel 2010 ha fatto parte del progetto FIRB 2010 "Clathrates hydrates and non-hydrates: multifunctional

materials for energy applications. Modeling of the crystallization and diffusion processes connected with their technological applications” e del progetto “SIMBEDD - Advanced Computational Methods for Biophysics, Drug Design and Energy Research” finanziato dall’Istituto Italiano di Tecnologia nell’ambito del programma SEED. Nel 2009 è stato parte del progetto “Advanced Molecular Simulations”, finanziato da Science Foundation Ireland.

E’ stato responsabile di diversi progetti per il finanziamento di *ore core*, nell’ambito di: CINECA ISCRA (2018), ICHEC Class A (1 progetto nel 2013-2015, 1 nel 2011-2014), ICHEC Class C (1 progetto nel 2012-2013, 1 nel 2011-2012 e 2 nel 2010-2011) e EU-FP7-DECI-DEISA Extreme Computing Initiative (2010-2011). Nel 2011 è stato responsabile del progetto “SimDepro: Deprotonation of organic molecules in solution by ab-initio MD and rare events simulation techniques.”, EC-FP7 Marie Curie IntraEuropean Fellowship (~ 180000 €). Nel 2017 è stato responsabile del progetto “Porous Lyophobic Crystalline Materials for Mechanical Energy Storage”, finanziato da “Sapienza” Università di Roma (~ 40000 €). Nello stesso anno ha ottenuto il Fondo per il Finanziamento delle Attività Base di Ricerca – FFABR (€3000).

E’ stato responsabile di progetti per il finanziamento di meeting (2008, 2010 e 2017) e scuole (2008) internazionali. In totale ha organizzato n.8 conferenze, congressi o scuole internazionali.

Dichiara di aver partecipato a 40 congressi internazionali con relazioni orali, di cui 21 come invited speaker. E’ stato *session chairperson* nei simposi “Perovskite Solar Cells” e “Mesoscopic Solar Cells” di due conferenze internazionali e nella conferenza “Superhydrophobicity, Bubble Stability and Heterogeneous Nucleation”.

E’ coautore di due invited review (2016). Tre lavori di cui il candidato è coautore ottengono una press release (2016 e 2018).

Nel 2014 è Section Editor della “Encyclopedia of Nanotechnology” di Springer, sezione “Molecular Modeling”. Nel 2012-2013 è Guest Editor per uno special issue di Molecular Physics.

E’ coautore di un capitolo di libro in Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 2009.

Nel 2012 ha vinto il premio Ireland’s Champions of EU research I candidato allega n.3 lettere di presentazione, rilasciate dal Prof. Carlo Massimo Casciola dell’Università degli Studi di Roma La Sapienza, dal Prof. Michael Grätzel dell’EPFL in Svizzera e da Giovanni Ciccotti, Professore Emerito di Sapienza Università di Roma e di University College of Dublin, tutte datate agosto 2018.

E’ in possesso di abilitazione scientifica nazionale (ASN) nei seguenti settori concorsuali: i) 03/A2 “Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche”, seconda fascia (conseguita nel 2017); ii) 03/B1 “Fondamenti delle Scienze Chimiche e dei Sistemi Inorganici”, seconda fascia (conseguita nel 2017); iii) 03/B2 “Fondamenti chimici delle Tecnologie”, seconda fascia (conseguita nel 2018); iv) 02/B2 “Fisica Teorica della Materia”, seconda fascia (conseguita nel 2017).

Il Candidato dichiara di essere in possesso dei seguenti indicatori:

- numero totale pubblicazioni = 58
- numero totale delle citazioni = 1343;
- numero medio di citazioni per pubblicazione = 23,15;
- indice di Hirsch = 18;
- Impact Factor totale = 253,994
- Impact Factor Medio per pubblicazione = 4,379
- H-INDEX corretto per l’età accademica = 0,9.

## VALUTAZIONE E DISCUSSIONE COLLEGIALE SU PROFILO E PRODUZIONE SCIENTIFICA DEL CANDIDATO

Il candidato presenta un profilo scientifico attinente il settore concorsuale 03/A2, SSD CHIM/02. Il campo di ricerca riguarda: i) lo studio teorico-simulativo di materiali per la produzione e l’accumulo di energia; ii) lo studio di transizioni di fase in materiali nel settore ingegneristico legato allo sfruttamento del metano; iii) lo studio di materiali superidrofobici e porosi liofobici per varie applicazioni; iv) lo sviluppo di metodi di simulazione per lo studio di eventi rari.

Il candidato è in possesso del titolo di dottore di ricerca in Scienze Chimiche ma non allega la tesi di dottorato né dichiara l’argomento.

Attualmente è ricercatore TD-a, nel SC 09/A1 “Ingegneria Aeronautica, Aerospaziale e Navale”, SSD ING-IND/06 “Fluidodinamica”, presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica ed

Aerospaziale di Sapienza Università di Roma, dove già nel 2016 era stato assegnista di ricerca per lo stesso settore scientifico disciplinare. Prima di intraprendere la sua collaborazione con Sapienza, trascorre tre anni presso University College Dublin come Postdoc e Marie-Curie Research Fellow e due anni presso École Polytechnique Fédérale de Lausanne come postdoc. Precedentemente era stato borsista e poi permanent staff presso il CASPUR, dopo aver trascorso due periodi formazione e ricerca all'estero.

Il candidato ha svolto attività didattica frontale, che comprende la titolarità di un corso d'insegnamento universitario nel SSD ING-IND/06 (4 CFU) e di un corso per la scuola di dottorato in Scienze Chimiche (6 CFU) in due successivi anni accademici. Nell'arco degli anni ha svolto corsi monografici o moduli (di 3, 6 o 24 ore) presso diverse realtà accademiche in Italia o all'estero. Ha svolto inoltre attività didattica integrativa a vario titolo presso le istituzioni frequentate, come coordinatore/supervisore di collaboratori post-doc e dottorandi. E' membro del Consiglio e di una commissione dell'area didattica cui afferisce presso Sapienza e del Collegio dei Docenti della Scuola Dottorale in Meccanica Teorica e Applicata.

Il candidato ha partecipato a livello europeo a progetti per il finanziamento di *ore core* e a progetti finanziati da fondazioni scientifiche svizzere o irlandesi. A livello nazionale ha fatto parte di un progetto FIRB e di un progetto finanziato dall'Istituto Italiano di Tecnologia. E' stato responsabile di diversi progetti per il finanziamento di *ore core* in ambito nazionale ed europeo e coordinatore di una grande progetto di ricerca di "Sapienza" Università di Roma. Dimostra proficue collaborazioni internazionali, testimoniate dalla partecipazione a progetti di pertinenza europea e dalla relativa pubblicistica.

La divulgazione scientifica della propria ricerca è caratterizzata da un'eccellente attività di presentazione a convegni internazionali e nazionali, con 40 relazioni orali, di cui 21 come invited speaker, rivestendo anche il ruolo di *chairperson* di sessione. Tali attività e le lettere di referenza presentate, scritte da esperti italiani ed esteri, testimoniano lo spessore scientifico che gli viene riconosciuto a livello europeo e nazionale.

Il curriculum del candidato riporta, altresì, una serie di riconoscimenti, fra cui il titolo di Visiting Scientist del Daresbury Laboratory, il premio "Ireland's Champions of EU research" e la selezione di tre suoi lavori come "highly cited" o "highlights". Tre suoi lavori ottengono anche una "press release".

Svolge attività editoriale come *guest editor* per Molecular Physics e come section editor in "Encyclopedia of Nanotechnology". E' autore di un capitolo di libro. Le 58 pubblicazioni Scopus, dichiarate dal candidato, sono di ottimo livello (IF medio per pubblicazione 4,4). Una parte delle pubblicazioni risulta congruente con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02; alcune pubblicazioni si collocano invece in riviste del settore della fisica. Si estendono su un intervallo temporale a partire dal 1998 e si distribuiscono abbastanza omogeneamente ad eccezione dei primissimi anni (nessuna pubblicazione nel 1999, nel 2000, e nel 2002), con H-index 18 e una media di 23 citazioni per pubblicazione.

Si è dedicato all'organizzazione di otto conferenze scientifiche o scuole internazionali, risultando in alcuni casi responsabile dei fondi per la loro implementazione.

Non presenta titolarità di brevetti né altra attività di trasferimento tecnologico.

Il profilo curricolare del candidato è parzialmente in linea con le attività di ricerca previste dal bando di concorso.

Il candidato è in possesso di Abilitazione Scientifica Nazionale nel settore concorsuale oggetto del bando nel ruolo di seconda fascia (ottenuta nel 2017).

**Giudizio: ottimo**

Per quanto attiene le 20 pubblicazioni allegata e sottoposte a valutazione, il candidato dimostra un significativo apporto individuale, risultando *corresponding author* in 10 pubblicazioni, ultimo autore in 4, primo autore in 2. Tutte le pubblicazioni rientrano nel I quartile (Q1). Le 20 pubblicazioni hanno impact factor medio pari a 7,7 (riferito all'anno di pubblicazione) e una media di 42,5 citazioni per pubblicazione (Scopus). Circa metà, delle 20 pubblicazioni, è legata allo studio, con approccio teorico-computazionale, di materiali per l'energia. Fra queste, 6 pubblicazioni riguardano materiali volti a dispositivi per la conversione elettrochimica dell'energia. La rimanente parte delle pubblicazioni presentate riguarda lo sviluppo di metodi computazionali ed approcci volti allo sfruttamento del metano.

**Giudizio: eccellente**

## **CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina**

### **PROFILO CURRICULARE DELLA CANDIDATA**

Valentina Migliorati si laurea in Chimica nel 2006 con 110/110 e lode svolgendo una tesi dal titolo "Studio strutturale e dinamico di soluzioni acquose di Hg(2+) e Cd(2+) attraverso metodi computazionali e spettroscopia di assorbimento dei raggi X". Nel 2009 consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso Università di Roma "La Sapienza" con una tesi dal titolo "A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration".

Dal 2010 è assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza", svolgendo attività su "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati" (2010÷2015) e "Sviluppo di metodi avanzati teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi" (2015÷2018).

Nel periodo 2008-2011 ha partecipato a quattro corsi post-lauream.

Negli anni accademici 2006/2007 ÷ 2017/2018 ha svolto delle lezioni di esercitazioni nell'ambito del corso di Chimica Fisica II (canale MZ) (Il anno Laurea triennale in Chimica) presso il Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza". Nel 2006/2007 ha avuto un contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico-integrative, propedeutiche e di recupero presso il Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza". Nel 2011 ha svolto didattica per la preparazione di esami universitari di Fisica presso Centro di editoria, orientamento e formazione universitaria CISU. Dal 2012 è "assistente" nella supervisione di tesi di laurea magistrale (5) e triennale (8) e di dottorati di ricerca (2).

Ha partecipato ai seguenti progetti di ricerca, finanziati da Sapienza Università di Roma: 1) Deep eutectic mixtures: a new generation of green solvents, nel 2016; 2) Hydrogen peroxide activation by non-heme iron complexes: a route for sustainable and selective oxidation processes, nel 2015; 3) The role of metal ions in the prion conversion of different human prion protein variants, nel 2014; 4) The coordination chemistry of lanthanides and actinides in complex liquids: a combined XAS and MD investigation, nel 2013; 5) The coordination chemistry of lanthanides and actinides in task specific ionic liquids: a combined experimental and theoretical investigation, nel 2012; 6) The structure of metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies, nel 2011; 7) Protic Ionic Liquids: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques, nel 2010.

Risulta responsabile dei seguenti progetti per il finanziamento computazionale (ore di calcolo) presso IS CRA-CINECA: 1) "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in Ionic Liquids", nel 2013; 2) "Structure and properties of geminal dicationic Ionic Liquids/water mixtures", nel 2015; 3) "Unraveling the peculiar properties of a new generation of green solvents: the deep eutectic solvents", nel 2017. Nel 2015 è inoltre responsabile di un progetto per avvio alla ricerca di Sapienza Università di Roma dal titolo "Unraveling halide hydration: the interplay of Car-Parrinello Molecular Dynamics and EXAFS spectroscopy (€ 3000).

Partecipa a convegni nazionali/internazionali e workshop con 4 contributi orali (di cui uno su invito presso "EMN Bangkok Meeting on Materials 2015") e 7 poster.

Dal 2012 è revisore di articoli scientifici per diverse riviste internazionali.

Tre articoli, di cui è co-autrice, riguardanti ricerche condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble, sono stati inclusi negli ESRF HIGHLIGHTS (2010 e 2015) e Spotlight on Science (2017). Un articolo di cui è co-autrice è stato selezionato per la pubblicazione dell'Inside Back Cover dalla rivista Chemistry – a European Journal (2017).

Allega n.1 lettere di presentazione, rilasciata dalla Prof.ssa Paola D'Angelo dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza.

E' in possesso di abilitazione scientifica nazionale (ASN) nei seguenti settori concorsuali: i) 03/A2 "Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche", seconda fascia (conseguita nel 2017); ii) 03/B1 "Fondamenti delle Scienze Chimiche e dei Sistemi Inorganici", seconda fascia (conseguita nel 2014 e nel 2018).

Il Candidato dichiara di essere in possesso dei seguenti indicatori:

- numero totale pubblicazioni = 48
- numero totale delle citazioni = 951;

- numero medio di citazioni per pubblicazione = 19,81;
- indice di Hirsch = 20;
- Impact Factor totale = 175,131
- Impact Factor Medio per pubblicazione = 3,807
- H-INDEX corretto per l'età accademica = 1,82.

## VALUTAZIONE E DISCUSSIONE COLLEGALE SU PROFILO E PRODUZIONE SCIENTIFICA DELLA CANDIDATA

La candidata presenta un profilo scientifico attinente il settore concorsuale 03/A2, SSD CHIM/02. Il campo di ricerca è principalmente legato allo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati attraverso approcci integrati di Dinamica Molecolare, spettroscopia di assorbimento e diffrazione dei raggi X.

La tesi di dottorato in Scienze Chimiche è congruente con il quadro di riferimento sopraindicato. Attualmente è assegnista di ricerca (SSD CHIM/02) presso il Dipartimento di Chimica di Sapienza Università di Roma, dove ha svolto tutta la sua attività post-dottorale ricoprendo lo stesso ruolo. Non ha goduto di periodi di formazione e ricerca presso altri istituti italiani o stranieri, ad eccezione della partecipazione a brevi corsi post-laurea presso l'Università di Amsterdam e il centro CASPUR di Roma.

La candidata ha svolto a livello accademico un'attività didattica limitata, svolgendo esercitazioni a supporto di un corso d'insegnamento della chimica-fisica. E' poi stata titolare di un contratto per l'espletamento di attività di tutorato, didattico-integrative, propedeutiche e di recupero presso il Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza". Ha partecipato alla supervisione di tesi di laurea magistrale e triennale e di dottorati di ricerca.

Ha partecipato a numerosi progetti di ricerca finanziati da Sapienza Università di Roma e fra questi risulta responsabile di un piccolo finanziamento per "avvio alla ricerca". E' stata inoltre responsabile di tre progetti per il finanziamento di ore di calcolo presso ISCRA-CINECA. Non risulta partecipante a progetti collaborativi finanziati dalla comunità europea (e.g. FP 6<sup>th</sup>-7<sup>th</sup> o H2020).

La divulgazione scientifica della propria ricerca è caratterizzata da una limitata attività come relatore a convegni nazionali/internazionali o workshop, che consiste in 4 contributi orali, di cui uno su invito.

Non risulta membro di comitati organizzatori e/o scientifici di convegni nazionali o internazionali.

La lettera di referenza presentata, scritta dal suo responsabile scientifico presso il Dipartimento di Chimica di Sapienza Università di Roma, testimonia l'apprezzamento che le viene riconosciuto.

Il curriculum della candidata non riporta il conseguimento di premi nazionali o internazionali per attività di ricerca. Quattro suoi articoli ricevono riconoscimenti in termini di "HIGHLIGHTS", "Spotlight" e pubblicazione nell'Inside Back Cover di rivista.

Le 48 pubblicazioni Scopus, dichiarate dalla candidata, sono di ottimo livello (IF medio per pubblicazione 3,8). La gran parte delle pubblicazioni risulta congruente con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02; alcune pubblicazioni sono invece riconducibili al settore delle scienze fisiche e della chimica inorganica. Si estendono su un intervallo temporale a partire dal 2008 e si distribuiscono omogeneamente, con H-index 20 e una media di circa 20 citazioni per pubblicazione.

Presenta attività di referaggio per riviste internazionali. Non riporta documentata attività editoriale né partecipazione alla pubblicazione di libri.

Non presenta titolarità di brevetti né altra attività di trasferimento tecnologico.

Il profilo curricolare della candidata non riguarda le attività di ricerca previste dal bando di concorso.

La candidata è in possesso di Abilitazione Scientifica Nazionale nel settore concorsuale oggetto del bando nel ruolo di seconda fascia (ottenuta nel 2017).

### **Giudizio: molto buono**

Per quanto attiene le 20 pubblicazioni allegate e sottoposte a valutazione, la candidata dimostra un apporto individuale di grande rilievo, risultando *corresponding author* in tutte le pubblicazioni, ultimo autore in 2, primo autore in 16. 19 pubblicazioni rientrano nel I quartile (Q1), 1 nel secondo

(Q2). Le 20 pubblicazioni hanno impact factor medio pari a 3,8 (riferito all'anno di pubblicazione) e una media di circa 17 citazioni per pubblicazione (Scopus). Tutte le 20 pubblicazioni si riferiscono a studi di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati, attraverso un approccio combinato teorico-sperimentale. Nessuna è direttamente riconducibile allo studio di materiali per l'accumulo e la conversione elettrochimica dell'energia.

**Giudizio: ottimo**

### **CANDIDATA: NAVARRA Maria Assunta**

#### **PROFILO CURRICULARE DELLA CANDIDATA**

Maria Assunta Navarra si laurea in Chimica nel 2002 con 110/110 e lode svolgendo una tesi dal titolo "Sintesi e caratterizzazione di membrane polimeriche a conduzione protonica per applicazione in celle a combustibile". Nello stesso anno supera l'esame di stato per l'abilitazione alla professione di Chimico col voto 100/100. Nel 2006 consegue il titolo di Dottore di Ricerca in Scienza dei Materiali presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza con una tesi dal titolo "Study of electrolytic and electrodic materials for low temperature fuel cell applications".

E' stata titolare delle seguenti posizioni presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza: 1) Collaborazione Coordinata e Continuativa per attività di ricerca su celle a combustibile a bassa temperatura (2002-2003); 2) Collaborazione a Progetto, finanziato da Filas S.p.A. su una ricerca dal titolo "Sviluppo e Ingegnerizzazione di un processo per il recupero e la valorizzazione di pile alcaline esauste" (2005-2006); 3) Borsa di Studio finanziata da Elettrochimica ed Energia sul tema "Studio di membrane protoniche composite per applicazioni in celle a combustibile" (2006); 4) Assegno di Ricerca sul progetto "Sviluppo di membrane protoniche e configurazioni elettrodiche innovative per celle a combustibile PEMFC" (2007÷2008); 5) Borsa di Studio sul progetto "Nuovi materiali anodici ed elettrolitici per batterie litio-ione" (2009); 6) Ricercatore a Tempo Determinato, SSD CHIM/02 – Chimica Fisica, per attività di ricerca "Batterie innovative al litio per accumulo di energia da fonti rinnovabili e trasporto su strada sostenibile" (2010÷2012); 7) Assegno di Ricerca sul progetto: "Preparazione e sviluppo di elettroliti gelificati per batterie litio-ione avanzate" (febbraio 2013-gennaio 2014).

Dal febbraio 2014 è Ricercatore a Tempo Determinato – tipologia A, SSD CHIM/02 – Chimica Fisica, per la ricerca "Sviluppo di materiali elettrolitici ed elettrodici per accumulatori litio ione ad elevata densità energetica" (contratto triennale + biennio di proroga).

E' stata titolare dei seguenti corsi d'insegnamento accademico (didattica frontale): i) "Fondamenti di Chimica (Organica ed Inorganica)", A.A. 2006/2007, facoltà di Scienze e Tecnologie Applicate, Università Telematica Guglielmo Marconi (Professore a Contratto); ii) "Ambiente e Beni Culturali" (CHIM/12, 6 CFU), LM in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali, Università degli Studi di Roma La Sapienza (A.A. 2012/2013); iii) "Chimica dei Beni Culturali e Metodi Elettrochimici", LM in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali, Università degli Studi di Roma La Sapienza, CHIM/02 (9 CFU negli A.A. 2014/2015 e 2015/2016, 6 CFU negli A.A. 2016/2017 e 2017/2018); iv) "Air quality analysis", corso in lingua inglese per la LM in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali, Università degli Studi di Roma La Sapienza, CHIM/02 (3 CFU, A.A. 2017/2018).

Ha tenuto la seguente attività didattica integrativa presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza, a partire dall'A.A. 2010/2011: i) *supervisor* di 2 tesi di dottorato, in Scienze Chimiche e in Mathematical Models for Engineering, Electromagnetics and Nanosciences, curriculum Materials Science; ii) *relatore* per tesi di laurea in Chimica e Chimica Industriale (triennali n.3 e magistrali n.8) e in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali (magistrali n.3); iii) *correlatore* per tesi di laurea magistrale (n.4) in Chimica Industriale; iv) Responsabile Scientifico di 1 borsa di studio e di n.6 Assegnisti di Ricerca, pagati su fondi di titolarità; v) *tutor* per un progetto di Tirocinio Formativo post-laurea, retribuito su fondi di responsabilità propria; vi) membro di Commissioni di Esami di profitto per gli Insegnamenti "Sistemi di produzione e accumulo dell'energia" (LM in Chimica Industriale) ed "Advanced chemical methods in archaeological materials science" (Erasmus Mundus Master in Archaeological Materials Science); vii) membro di commissioni di Laurea triennale e magistrale in Chimica e Chimica Industriale, di Laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per la Conservazione dei Beni Culturali e in ARCHMAT Erasmus Mundus Master in Archaeological Materials Science; viii) membro di commissioni

esaminatrici per l'attribuzione di Assegni di Ricerca, Borse di Studio e Tirocinio nel SSD CHIM/02; ix) revisore esterno di 6 Tesi di Dottorato (4 dell'Università degli Studi di Camerino, 1 dell'Università di Chieti e Pescara e 1 dell'Università di Roma Tor Vergata).

Partecipa ai seguenti progetti finanziati da bandi europei: 1) LiSSEN "Lithium Sulfur Superbattery Exploiting Nanotechnology" (7<sup>th</sup> EU Framework Program), 2012÷2015; 2) APPLES "Advanced, High Performance, Polymer Lithium batteries for Electrochemical Storage" (7<sup>th</sup> EU Framework Program), 2011÷2014; 3) Carisma "Coordination action for research on intermediate and high temperature specialised membrane electrode assemblies" (6<sup>th</sup> EU Framework Program), 2007÷2008; 4) ALISTORE "Advanced Lithium energy Storage system based on the use of nano-powders and nano-composites electrodes/electrolytes" (6<sup>th</sup> EU Framework Program), 2004÷2009.

Partecipa ai seguenti progetti finanziati da bandi nazionali: 1) PRIN 2010-2011, NAMED-PEM "Advanced nanocomposite membranes and innovative electrocatalysts for durable polymer electrolyte membrane fuel cells"; 2) PRIN 2007, "Nuovi materiali anodici (leghe) ed elettrolitici (liquidi ionici) per batterie litio-ione"; 3) FIRB 2006, RINNOVA "Tecnologie elettrochimiche innovative per l'accumulo di energia da fonti rinnovabili"; 4) FISR 2003, NUME "Sviluppo di membrane protoniche composite e di configurazioni elettrodiche innovative per celle a combustibile con elettrolita polimerico"; 5) PRIN 2001, "Membrane nanocomposite e microporose a base di PVdF dotate di proprietà anti-trafilamento del metanolo per DM-PEFC"; 6) programma SEED dell'Istituto Italiano di Tecnologia, "Rechargeable, advanced, nano structured, lithium batteries with high storage capability" (2012); 7) FILAS SpA, "Sviluppo e Ingegnerizzazione di un processo per il recupero e la valorizzazione di pile alcaline esauste" (2005).

E' coordinatore/proponente dei seguenti progetti finanziati dall'Ateneo di Roma La Sapienza: 1) BattEI "Stabilizing the performance of high-voltage lithium Batteries by new generation composite Electrolytes", 2017 (€ 13000); 2) "Polymer electrolyte membrane water electrolyzers: innovative, cost-effective electrocatalysts with enhanced durability", 2015 (€ 15000); 3) "Electrochemical production of Hydrogen via water splitting in Polymer Electrolyte Membrane (PEM) electrolyzers", 2015 (€ 5000 per il finanziamento di un professore visitatore); 4) "Advanced nano-composite hybrid membranes and innovative electrocatalysts for fuel cell applications", 2014 (€ 9000); 5) "Synthesis and physical chemical characterizations of proton conducting, nano-composite polymer electrolytes for fuel cell applications", progetto Interdipartimentale, 2010 (€ 85000).

E' partecipante ad ulteriori 2 progetti finanziati dall'Ateneo di Roma La Sapienza, nel 2011 e nel 2016.

E' responsabile scientifico dei seguenti progetti finanziati da Industrie: 1) "Solid State Batteries using Novel Composite Anodes", finanziato da Samsung R&D Institute Japan nel 2016, 2017 e 2018 (€ 45000/anno); 2) "Preparation and characterization of samples of gel polymer electrolytes with certain selected PVDF grades", finanziato da Solvay Specialty Polymers Italy S.p.A. nel 2017 (€ 25000 per 4 mesi).

E' partecipante ad ulteriori 2 progetti finanziati da ENI SpA (2010) e IDEA LAB Srl (2008).

E' stata *visiting PhD student* e, poi, ricercatrice visitatrice presso: 1) Chalmers University of Technology, Göteborg, Svezia, per lo studio di elettroliti polimerici tramite Spettroscopia Raman e IR (4 mesi nel 2003); 2) CNR – ITAE, Messina, per la caratterizzazione di materiali elettrolitici in celle a combustibile ad idrogeno e metanolo diretto (maggio-giugno 2003); 3) Hunter College of City University of New York (CUNY), USA per lo studio dei processi di Diffusione e Rilassamento in elettroliti polimerici e liquidi ionici tramite NMR (gennaio-febbraio 2005, marzo 2008, maggio 2010); 4) Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA, per la caratterizzazione di materiali elettrolitici ed elettrodici in celle a combustibile a idrogeno (febbraio-giugno 2005); 5) Center for Solar Energy and Hydrogen Research, ZSW, Ulm, Germania, per la preparazione di materiali elettrolitici ed elettrodici e loro applicazione in celle a combustibile a membrana polimerica alimentate a idrogeno (novembre 2006).

Dal 2002 è iscritta all'Ordine Interregionale dei Chimici di Lazio, Umbria, Abruzzo e Molise, al Consiglio Nazionale dei Chimici e alla Società Chimica Italiana (I Divisione "Elettrochimica", II Divisione "Chimica Fisica", Gruppo Interdivisionale "Enerchem"). E' socio ECS (Electrochemical Society) dal 2003 ed ISE (International Society of Electrochemistry) dal 2006. Dal 2009 è afferente al Centro di Ricerca dell'Università di Roma La Sapienza, HYDRO-ECO "Hydrogen as an alternative and ecological energy carrier". Nel triennio 2016-2018 è *invitata permanente*, in

rappresentanza della Divisione di Elettrochimica, nel Consiglio Direttivo del Gruppo EnerCHEM (Gruppo Interdivisionale di Chimica per le Energie Rinnovabili) della Società Chimica Italiana.

E' vincitrice dei seguenti premi: 1) Premio Eni Italgas "Debut in Research", XIX edizione, per gli studi condotti su nuove tecnologie applicate alle celle a combustibile; 2) Premio di Dottorato "Fondazione Oronzio e Niccolò De Nora", assegnato dalla Divisione di Elettrochimica della Società Chimica Italiana; 3) Premio "Serena Maurizi" assegnato alle migliori comunicazioni orali del IV Convegno Giovani del Dipartimento di Chimica di Sapienza Università di Roma.

Svolge la seguente attività di trasferimento tecnologico: i) socio fondatore di "Eco Recycling" Srl, primo SPIN OFF di trasferimento tecnologico, nel settore dello smaltimento dei rifiuti speciali, dell'Università di Roma La Sapienza (dal 2008); ii) brevetto Europeo "Method of making an electrochromic device" di Solvay Specialty Polymers Italy SpA, nel ruolo di Inventore (2017).

La candidata ha svolto le seguenti attività per l'implementazione di conferenze scientifiche: i) membro del Comitato Scientifico di 4 convegni internazionali, 2 simposi in convegni internazionali e della I Scuola ENERCHEM; ii) membro del Comitato Organizzatore di 3 convegni internazionali e 1 simposio in convegno internazionale; iii) responsabile delegato del Comitato Organizzativo e Scientifico di un workshop internazionale nel settore idrogeno (2014); iv) responsabile (*presidente*) del convegno internazionale "Ionic Liquids for Electrochemical Devices, ILED-6 2018".

E' Esperto Valutatore Scientifico, selezionata da Research Executive Agency della Commissione Europea, nell'ambito di HORIZON 2020 "FET-OPEN-NOVEL IDEAS FOR RADICALLY NEW TECHNOLOGIES", bandi 2016 e 2017.

E' *Guest Editor* di uno *special issue* in Electrochimica Acta (2018). È revisore di articoli scientifici per diverse riviste internazionali. Ha contribuito alla pubblicazione di un volume dell'Enciclopedia Italiana Treccani, Scienza e Tecnica, come autore di un capitolo e presenta una pubblicazione scientifica su rivista nazionale.

Come autore principale/presentatore partecipa a: i) 43 convegni internazionali, con 12 contributi poster, 22 contributi orali (di cui uno dichiarato "*highlight*") e 9 relazioni su invito, ricoprendo anche il ruolo di *session chairperson*; ii) 14 convegni nazionali e workshop, con 2 contributi poster, 8 contributi orali e 4 seminari su invito. Frequenta inoltre diversi corsi, congressi e workshop.

Presenta n.8 attestati dell'attività di ricerca svolta presso istituzioni estere e un ente nazionale. Allega n.3 lettere di presentazione, rilasciate dal Prof. Ohno, rettore della Tokyo University of Agriculture and Technology (Giappone), dal Prof. Matic di Chalmers University of Technology (Svezia) e dalla Prof.ssa Licoccia dell'Università di Roma Tor Vergata, tutte datate agosto 2018.

Nella Valutazione della Qualità della Ricerca (ANVUR) ottiene punteggio 1 – valutazione Eccellente – su tutti i prodotti presentati (VQR 2004-2010 e VQR 2011-2014).

E' in possesso di abilitazione scientifica nazionale (ASN) nei seguenti settori concorsuali: i) 03/A2 "Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche", seconda fascia (nelle tornate 2012, 2013 e 2016) e prima fascia (nella tornata 2016); ii) 03/B2 "Fondamenti chimici delle Tecnologie", seconda fascia (nelle tornate 2012 e 2013); iii) 03/B1 "Fondamenti delle Scienze Chimiche e dei Sistemi Inorganici", seconda fascia e prima fascia (nella tornata 2016).

La Candidata dichiara di essere in possesso dei seguenti indicatori:

- numero totale pubblicazioni = 60 (58 papers + 2 atti di convegno - Scopus)
- numero totale delle citazioni = 1160
- numero medio di citazioni per pubblicazione = 20
- indice di Hirsch = 20
- Impact Factor totale = 196,667
- Impact Factor Medio per pubblicazione = 3,4
- H-INDEX corretto per l'età accademica = 1,33.

La candidata usufruisce di periodi di congedo parentale e per maternità, per un totale di 6,5 mesi (non sottratti nel calcolo dell'età accademica).

#### VALUTAZIONE E DISCUSSIONE COLLEGIALE SU PROFILO E PRODUZIONE SCIENTIFICA DELLA CANDIDATA

La candidata presenta un profilo scientifico attinente il settore concorsuale 03/A2, SSD CHIM/02. Il campo di ricerca è essenzialmente legato allo sviluppo di nuove componenti elettrodiche ed

elettrolitiche per dispositivi elettrochimici volti alla conversione e all'accumulo di energia e riguarda a sintesi e la caratterizzazione dei materiali, attraverso tecniche elettrochimiche e chimico-fisiche.

La tesi di dottorato della candidata è congruente con il quadro di riferimento sopraindicato.

Attualmente è ricercatore TD-A, nel SSD CHIM/02, presso il Dipartimento di Chimica di Sapienza Università di Roma, dove ha svolto la gran parte della sua attività lavorativa come borsista, assegnista e già RTD, alternando numerosi periodi di formazione e ricerca all'estero, documentati da dichiarazioni dell'ente ospitante relative alle attività svolte.

La candidata ha svolto una continua ed intensa attività didattica frontale, che comprende la titolarità di corsi d'insegnamento universitari nel SSD CHIM/02 (6÷9 CFU/anno), anche in campo elettrochimico. Ha svolto inoltre molteplici attività di didattica integrativa, come relatore e correlatore di tesi di laurea magistrali e triennali, come supervisore di tesi di dottorato, membro di commissioni d'esame, di laurea e per l'attribuzione di assegni di ricerca e borse di studio, come tutor di tirocinio e revisore esterno di tesi di dottorato di altre università.

La candidata ha partecipato a diversi progetti finanziati dalla commissione europea, nell'ambito del 6° e 7° programma quadro, e nazionali, nell'ambito dei programmi FISR, PRIN e FIRB, su tematiche inerenti batterie al litio e celle a combustibile. E' stata partecipante e coordinatore di numerosi progetti finanziati dall'Ateneo di Roma La Sapienza, fra questi un grande progetto interdipartimentale che ha coordinato nel 2010. E' stata ed è responsabile scientifico di progetti di ricerca finanziati da importanti industrie multinazionali. I finanziamenti ricevuti le hanno permesso di bandire, come responsabile, 7 assegni di ricerca, 1 borsa di studio e 1 borsa di tirocinio post-lauream, a supporto della sua attività di coordinamento di gruppi di ricerca. Dimostra numerose e proficue collaborazioni internazionali, testimoniate dalla partecipazione a progetti comunitari e dalla relativa pubblicitaria.

La divulgazione scientifica della propria ricerca è caratterizzata da un'eccellente attività di presentazione a convegni internazionali e nazionali, con oltre 30 contributi orali e 13 relazioni su invito, rivestendo anche il ruolo di *chairperson* di sessione. Tali inviti e le lettere di referenza presentate, scritte da esperti italiani ed esteri, testimoniano lo spessore scientifico che le viene riconosciuto a livello internazionale e nazionale.

Il curriculum della candidata riporta, altresì, il conseguimento di premi che confermano la qualità della sua ricerca, tra cui il prestigioso premio ENI "Debut in Research" e il premio di dottorato della Divisione di Elettrochimica della SCI.

Presenta un'intensa attività di referaggio per riviste internazionali di settore e per bandi competitivi comunitari FET H2020. Svolge attività editoriale (*guest editor*) per *Electrochimica Acta*.

E' attiva in associazioni scientifiche a livello nazionale (Società Chimica Italiana), come afferente alla divisione di Elettrochimica e Chimica-Fisica e membro del consiglio direttivo del gruppo interdivisionale ENERCHEM, e a livello internazionale nel settore elettrochimico (membro dell'International Society of Electrochemistry e dell'Electrochemical Society).

Si è dedicata all'organizzazione di numerose conferenze scientifiche internazionali, nel settore dei materiali e in ambito elettrochimico, nel ruolo di responsabile (presidente) o come membro del comitato scientifico e/o organizzatore.

Presenta, infine, una buona attività di trasferimento tecnologico, come socia e fondatrice di uno SPIN-OFF universitario e inventrice di un brevetto.

Il profilo curricolare della candidata è perfettamente in linea con le attività di ricerca previste dal bando di concorso. Le 60 pubblicazioni Scopus, dichiarate dalla candidata, sono di ottimo livello (IF medio per pubblicazione 3,4), come testimonia il punteggio ottenuto (eccellente) nelle due valutazioni della qualità della ricerca (VQR – ANVUR). Tutte le pubblicazioni sono congruenti con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02. Si estendono su un intervallo temporale a partire dal 2003 e si distribuiscono omogeneamente nonostante i periodi di congedo, con H-index 20 e una media di 20 citazioni per pubblicazione.

La maturità scientifica della candidata nella sua completezza si distingue in ragione del conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale nel settore concorsuale oggetto del bando sia nel ruolo di seconda fascia (ottenuta già nella prima tornata del 2012 e confermata nelle tornate 2013 e 2016) che di prima fascia (tornata 2016). Nella Valutazione della Qualità della Ricerca (ANVUR) ottiene punteggio 1 – valutazione Eccellente – su tutti i prodotti presentati (VQR 2004-2010 e VQR 2011-2014).

**Giudizio: eccellente**

Per quanto attiene le 20 pubblicazioni allegate e sottoposte a valutazione, la candidata dimostra un significativo apporto individuale, risultando *corresponding author* in 7 pubblicazioni, ultimo autore in 5, primo autore in 3; risulta inoltre unico autore di un articolo scientifico nel 2013 che totalizza 48 citazioni su una rivista ad alto impatto (IF 5.069). 18 pubblicazioni rientrano nel I quartile (Q1), 2 nel secondo (Q2). Le 20 pubblicazioni hanno impact factor medio pari a 5,3 (nell'anno di riferimento del bando di concorso) e 4,4 (riferito all'anno della pubblicazione) e una media di 27,5 citazioni per pubblicazione (Scopus). Sono tutte legate allo studio, con approccio prevalentemente sperimentale, di materiali elettrodici ed elettrolitici per l'accumulo e la conversione elettrochimica dell'energia.

**Giudizio: eccellente**

#### **Giudizio collegiale comparativo dei candidati**

La Commissione ha messo a confronto curriculum, titoli e produzione scientifica dei candidati. Dai giudizi analitici sopra illustrati emerge il seguente giudizio preliminare comparativo:

Gontrani Lorenzo	CV-titoli: ottimo	Pubblicazioni: ottimo
Mancini Giordano	CV-titoli: molto buono	Pubblicazioni: ottimo
Meloni Simone	CV-titoli: ottimo	Pubblicazioni: eccellente
Migliorati Valentina	CV-titoli: molto buono	Pubblicazioni: ottimo
Navarra Maria Assunta	CV-titoli: eccellente	Pubblicazioni: eccellente