



**PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 09/A1- SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE ING-IND/06 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA MECCANICA E AEROSPAZIALE DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N.105/2020 Rep. n. 105/2020 Prot. n. 2019 del 01/07/2020
"Simulazioni atomistiche del cancello idrofobo in canali ionici biologici"**

VERBALE N. 2 – SEDUTA VALUTAZIONE TITOLI

L'anno 2020, il giorno 5 del mese di novembre si è riunita in modalità telematica via Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI> la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 09/A1 – Settore scientifico-disciplinare ING-IND/06 - presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 140/2020 Rep. n. 140/2020 Prot. n. 2675 del 16/9/2020 e composta da:

- Prof. Raffaele Savino – professore ordinario presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II" (presidente);
- Prof. Prof. Mauro Chinappi – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata" (componente);
- Prof. Alberto Giacomello – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (segretario).

Il Prof. Savino e il Prof. Chinappi sono collegati per via telematica tramite Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI>.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 11.

Il Presidente informa la Commissione di aver acquisito dal responsabile del procedimento l'elenco dei candidati alla procedura selettiva e la documentazione, in formato elettronico (e cartaceo), trasmessa dagli stessi.

La Commissione giudicatrice dichiara sotto la propria responsabilità che tra i componenti della Commissione ed i candidati non sussistono rapporti 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 alla procedura selettiva risultano essere i seguenti:

1. Carlo GUARDIANI

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 1 del verbale della seduta del 19 ottobre 2020.

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

Sulla base della valutazione dei titoli e della produzione scientifica dei candidati, sono ammessi a sostenere il colloquio pubblico i Dottori:

1. Carlo GUARDIANI

Il colloquio si terrà il giorno 30 novembre 2020 alle ore 11,30 in modalità telematica via Skype al seguente link <https://join.skype.com/a4lkBW0aDr1v>. In caso di rinuncia ai termini di preavviso, il colloquio si terrà il giorno 16 novembre 2020 alle ore 11,30 in modalità telematica via Skype al seguente link <https://join.skype.com/a4lkBW0aDr1v>.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 12.30.

Letto, confermato e sottoscritto.

Firma del Commissari

Prof. Raffaele Savino

Prof. Mauro Chinappi

Prof. Alberto Giacomello



ALLEGATO N. 2 AL VERBALE N. 2

PROCEDURA SELETTIVA PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA A PER IL SETTORE CONCORSUALE 09/A1- SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE ING-IND/06 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA MECCANICA E AEROSPAZIALE DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N.105/2020 Rep. n. 105/2020 Prot. n. 2019 del 01/07/2020

"Simulazioni atomistiche del cancello idrofobo in canali ionici biologici"

L'anno 2020, il giorno 5 del mese di novembre si è riunita in modalità telematica via Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI> la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 09/A1 – Settore scientifico-disciplinare ING-IND/06 - presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 140/2020 Rep. n. 140/2020 Prot. n. 2675 del 16/9/2020 e composta da:

- Prof. Raffaele Savino – professore ordinario presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II" (presidente);
- Prof. Prof. Mauro Chinappi – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata" (componente);
- Prof. Alberto Giacomello – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (segretario).

Il Prof. Savino e il Prof. Chinappi sono collegati per via telematica tramite Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI>.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 11.

La Commissione, accertato che i criteri generali fissati nella precedente riunione sono stati resi pubblici per più di sette giorni, inizia la verifica dei nomi dei candidati, tenendo conto dell'elenco fornito dal Responsabile del procedimento.

La Commissione, presa visione dell'elenco dei candidati alla procedura selettiva, delle esclusioni e delle rinunce sino ad ora pervenute, prende atto che i candidati da valutare ai fini della procedura selettiva sono n. 1 e precisamente:



1. Carlo GUARDIANI

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

Per ogni candidato, la Commissione verifica che i titoli allegati alla domanda siano stati certificati conformemente al bando.

Procede poi ad elencare analiticamente i Titoli.

Procede poi ad elencare analiticamente le Pubblicazioni trasmesse dal candidato

La Commissione elenca, per ogni candidato, i titoli e le pubblicazioni valutabili (allegato 2/A).

1) Vengono esaminati i titoli e le pubblicazioni del candidato Carlo GUARDIANI

La Commissione inizia la valutazione dei titoli, delle pubblicazioni e delle tesi di dottorato dei candidati

Si procede seguendo l'ordine alfabetico dei candidati.

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

Candidato Carlo GUARDIANI

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 (all. 2/B).

La Commissione, dopo aver effettuato una discussione collegiale sul profilo e sulla produzione scientifica dei candidati, ammette alla fase successiva della procedura i seguenti candidati:

Carlo GUARDIANI

Il Presidente delega il Segretario a contattare il Responsabile del procedimento per comunicare ai suddetti candidati la data di convocazione per lo svolgimento del colloquio in forma seminariale previsto dal bando.



La Commissione viene sciolta alle ore 12.30 e si riconvoca per il giorno 30 novembre 2020 alle ore 11,30. In caso di rinuncia ai termini di preavviso da parte del candidato, la convocazione è per il giorno 16 novembre 2020 alle ore 11,30.

Letto approvato e sottoscritto seduta stante.

La Commissione

Prof. Raffaele Savino

Prof. Mauro Chinappi

Prof. Alberto Giacomello



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 09/A1- SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE ING-IND/06 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA MECCANICA E AEROSPAZIALE DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N.105/2020 Rep. n. 105/2020 Prot. n. 2019 del 01/07/2020
"Simulazioni atomistiche del cancello idrofobo in canali ionici biologici"

L'anno 2020, il giorno 5 del mese di novembre si è riunita in modalità telematica via Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI> la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 09/A1 – Settore scientifico-disciplinare ING-IND/06 - presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 140/2020 Rep. n. 140/2020 Prot. n. 2675 del 16/9/2020 e composta da:

- Prof. Raffaele Savino – professore ordinario presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II" (presidente);
- Prof. Prof. Mauro Chinappi – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata" (componente);
- Prof. Alberto Giacomello – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (segretario).

Il Prof. Savino e il Prof. Chinappi sono collegati per via telematica tramite Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI>.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 11.

La Commissione prende atto dei titoli per i quali sia stata presentata idonea documentazione:



CANDIDATO: Carlo GUARDIANI

VERIFICA TITOLI VALUTABILI:

1. Titolo: partecipazione in qualità di coautore e co-PI al progetto PRACE "CRAC-Gate Gating in calcium release-activated calcium channel": È VALUTABILE.
2. Titolo: comprovata partecipazione alle attività di gruppi di ricerca internazionali presso le università di Warwick e Lancaster: È VALUTABILE.
3. Titolo: organizzazione del workshop scientifico "Frontiers in ion channels and nanopores: theory, experiments and simulation": È VALUTABILE.
4. Titolo: partecipazione a convegni in qualità di relatore invitato: È VALUTABILE.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1. Titolo della pubblicazione "Different roles for aspartates and glutamates for cation permeation in bacterial sodium channels": VALUTABILE
2. Titolo della pubblicazione "On the selectivity of the NaChBac channel: an integrated computational and experimental analysis of sodium and calcium permeation": VALUTABILE
3. Titolo della pubblicazione "Sodium Binding Sites and Permeation Mechanism in the NaChBac Channel: a Molecular Dynamics Study": VALUTABILE
4. Titolo della pubblicazione "VDAC3 as a sensor of oxidative state of the intermembrane space of mitochondria: the putative role of cysteine residue modifications": VALUTABILE
5. Titolo della pubblicazione "The N-Terminal Peptides of the Three Human Isoforms of the Mitochondrial Voltage-Dependent Anion Channel Have Different Helical Propensities": VALUTABILE
6. Titolo della pubblicazione "Efficient Nonequilibrium Method for Binding Free Energy Calculations in Molecular Dynamics Simulations": VALUTABILE
7. Titolo della pubblicazione "The conformational landscape of Tartrate-based inhibitors of the TACE enzyme as revealed by Hamiltonian Replica Exchange Simulation": VALUTABILE
8. Titolo della pubblicazione "Opening pathways of the DNA clamps proliferating cell nuclear antigen and Rad9-Rad1-Hus1": VALUTABILE
9. Titolo della pubblicazione "Conformational Landscape of N-Glycosylated Peptides Detecting Autoantibodies in Multiple Sclerosis, Revealed by Hamiltonian Replica Exchange": VALUTABILE
10. Titolo della pubblicazione "Histone H4 acetylation differentially modulates



arginine methylation by an in cis mechanism”: VALUTABILE

11. Titolo della pubblicazione “Fragment 101-108 of Myelin Oligodendrocyte Glycoprotein: a possible lead compound for Multiple Sclerosis”: VALUTABILE
12. Titolo della pubblicazione “Testing simplified protein models of the hPin1 WW domain”: VALUTABILE

TESI DI DOTTORATO

Non presentata

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato presenta nel curriculum una produzione complessiva pari a n. 38 pubblicazioni, di cui 28 in riviste con revisione tra pari e 10 in atti di convegno, libri o capitoli di libri.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 12.30.

Letto, approvato e sottoscritto.

Firma del Commissari

Prof. Raffaele Savino

Prof. Mauro Chinappi

Prof. Alberto Giacomello



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 CONCORSUALE 09/A1- SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE ING-IND/06 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA MECCANICA E AEROSPAZIALE DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.D. N.105/2020 Rep. n. 105/2020 Prot. n. 2019 del 01/07/2020
"Simulazioni atomistiche del cancello idrofobo in canali ionici biologici"

L'anno 2020, il giorno 5 del mese di novembre si è riunita in modalità telematica via Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI> la Commissione giudicatrice della procedura selettiva per il reclutamento di n. 1 Ricercatore a tempo determinato di tipologia A per il Settore concorsuale 09/A1 – Settore scientifico-disciplinare ING-IND/06 - presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", nominata con D.D. n. 140/2020 Rep. n. 140/2020 Prot. n. 2675 del 16/9/2020 e composta da:

- Prof. Raffaele Savino – professore ordinario presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II" (presidente);
- Prof. Prof. Mauro Chinappi – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria industriale dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata" (componente);
- Prof. Alberto Giacomello – professore associato presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (segretario).

Il Prof. Savino e il Prof. Chinappi sono collegati per via telematica tramite Skype al seguente link <https://join.skype.com/lgAK20xx7oYI>.

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 11 e procede ad elaborare la valutazione individuale e collegiale dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati.



CANDIDATO: Carlo GUARDIANI

COMMISSARIO 1: Prof. Raffaele SAVINO

TITOLI

Valutazione sui titoli

La carriera del candidato, dopo un master in scienze biologiche e un dottorato riguardante la dinamica non-lineare e i sistemi complessi, è stata caratterizzata da attività di ricerca interdisciplinari principalmente nei settori della biofisica e della chimica computazionale. Ha collaborato con diversi gruppi sia in Italia, sia all'estero, in particolare nel settore della biofisica computazionale.

Recentemente si è occupato di simulazioni dinamiche su scala molecolare di canali ionici. I titoli presentati mostrano che il candidato è in possesso di adeguata esperienza e preparazione per svolgere le attività di ricerca nella tematica oggetto del bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Le pubblicazioni presentate riguardano principalmente simulazioni numeriche di sistemi biologici. Le tematiche, a cavallo fra la fisica teorica e la chimica computazionale, sono strettamente correlate con il presente bando.

Esse sono originali e buona appare la collocazione editoriale. Nei lavori vengono considerate diverse tecniche per la simulazione numerica di sistemi biologici su scala molecolare e in particolare di canali ionici.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Nel curriculum il candidato dichiara una produzione complessiva di 38 pubblicazioni, di cui 28 su riviste con revisione tra pari e 10 in atti di convegno, libri o capitoli di libri.

Valutazione sulla produzione complessiva

La produzione scientifica ha avuto uno sviluppo temporale continuo, appare complessivamente di buona qualità e pienamente coerente con la tematica oggetto del bando.

COMMISSARIO 2: Prof. Mauro CHINAPPI

TITOLI

Valutazione sui titoli

I titoli presentati dal candidato mostrano che la sua carriera è stata caratterizzata da un'attività di ricerca fortemente interdisciplinare. La sua maturità scientifica e la rilevanza dei suoi contributi è testimoniata da inviti a svolgere interventi a convegni nazionali ed internazionali. Il candidato ha inoltre partecipato all'organizzazione di



un workshop scientifico interdisciplinare nell'ambito dei fenomeni di trasporto in nanopori e canali ionici. Il commissario reputa l'esperienza scientifica del candidato, per quanto emerge dai titoli, ideale per lo svolgimento delle attività di ricerca previste dal bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Le pubblicazioni presentate sono tutte valutabili e presentano un'elevata originalità e un ottimo rigore metodologico. Le tematiche trattate riguardano principalmente simulazioni numeriche di macromolecole biologiche. Nelle pubblicazioni presentate vengono utilizzate varie tecniche che spaziano dalla dinamica molecolare classica ad approcci coarse-grained. Le tecniche sono pienamente coerenti con il tema del bando. In particolare, le pubblicazioni [1,2,3,5] riguardano simulazioni di canali ionici della permeabilità di canali ionici, una tematica strettamente correlata con il presente bando.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Nel curriculum il candidato dichiara una produzione complessiva di 38 pubblicazioni, di cui 28 su riviste con revisione tra pari e 10 in atti di convegno, libri o capitoli di libri.

Valutazione sulla produzione complessiva

La produzione complessiva, per come emerge dalle pubblicazioni e dal CV, è di buon livello. Le pubblicazioni sono di buona qualità come attestato dalla loro collocazione editoriale. L'attività di ricerca è nel complesso pienamente coerente con l'oggetto del presente bando.

COMMISSARIO 3: Prof. Alberto GIACOMELLO

TITOLI

Valutazione sui titoli

I titoli presentati dal candidato evidenziano la maturità scientifica del candidato e mostrano un'elevata qualità della produzione scientifica, comprovata da inviti a svolgere interventi a convegni nazionali ed internazionali. La carriera del candidato si è sviluppata presso gruppi di ricerca internazionali noti nel campo delle simulazioni biofisiche e di canali ionici in un contesto fortemente interdisciplinare, a cavallo tra biologia e un approccio teorico/fisico.

Nel complesso il commissario giudica ottime la preparazione e l'esperienza scientifica del candidato che emergono dai titoli; il curriculum risulta idoneo a svolgere la linea di ricerca prevista dal bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Le 12 pubblicazioni presentate sono tutte valutabili e sono caratterizzate da un'ottima



collocazione editoriale (impact factor medio delle riviste dichiarato 5,38), un buon numero medio di citazioni (dichiarato: 19,66 per pubblicazione), un'elevata originalità e rigore metodologico. In 7 pubblicazioni il candidato risulta primo autore. I temi trattati riguardano principalmente simulazioni in ambito biofisico; specialmente nelle pubblicazioni recenti, l'ambito di ricerca risulta pienamente coerente con il tema del bando, ovvero simulazioni atomistiche di canali ionici biologici. Infine, le pubblicazioni evidenziano l'esperienza del candidato con strumenti di simulazione coarse-grained e atomistici nell'ambito biomolecolare e la sua capacità di sviluppare ed utilizzare strumenti computazionali avanzati, anche per il campionamento di eventi rari, di interesse per la linea di ricerca oggetto del bando.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Nel curriculum il candidato dichiara una produzione complessiva pari a n. 38 pubblicazioni, di cui 28 su riviste con revisione tra pari e 10 in atti di convegno, libri o capitoli di libri.

Valutazione sulla produzione complessiva

Sulla base dei titoli, delle pubblicazioni e del CV, la produzione complessiva del candidato risulta di buon livello e continua dal punto di vista temporale; le pubblicazioni sono valutate di elevata qualità attesa la collocazione editoriale, il carattere innovativo e il rigore metodologico delle stesse. L'attività di ricerca è nel complesso pienamente coerente con l'oggetto del bando.

La valutazione della produzione scientifica complessiva è ottima.

GIUDIZIO COLLEGIALE

TITOLI

Valutazione sui titoli

La carriera del candidato è caratterizzata da attività di ricerca fortemente interdisciplinari principalmente nei settori della biofisica e delle simulazioni atomistiche, con tematiche orientate ai canali ionici nelle ricerche più recenti. Il candidato ha collaborato con diversi gruppi sia in Italia che all'estero ed è stato invitato a svolgere interventi a convegni nazionali ed internazionali. I titoli presentati mostrano che il candidato è in possesso di adeguata esperienza e preparazione per svolgere la linea di ricerca oggetto del bando.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

Le pubblicazioni presentate sono tutte valutabili e presentano un'elevata originalità e un ottimo rigore metodologico. Buona appare la collocazione editoriale. Le pubblicazioni riguardano principalmente simulazioni numeriche di sistemi biologici su argomenti strettamente correlati con il presente bando, in particolare per quanto riguarda la simulazione di canali ionici e le tecniche di campionamento di eventi rari.



CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Nel curriculum il candidato dichiara una produzione complessiva di 38 pubblicazioni, di cui 28 su riviste con revisione tra pari e 10 in atti di convegno, libri o capitoli di libri.

Valutazione sulla produzione complessiva

La produzione scientifica ha avuto uno sviluppo temporale continuo, appare complessivamente di buona qualità e pienamente coerente con la tematica oggetto del bando.

In conclusione, la commissione valuta la preparazione del candidato adeguata a svolgere la linea di ricerca oggetto del bando.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 12.30.

Letto, approvato e sottoscritto.

F.TO la Commissione
Firma del Commissari

Prof. Raffaele Savino

Prof. Mauro Chinappi

Prof. Alberto Giacomello