

PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCURSALE 03/A2 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.R. N. 3227/2021 DEL 02.12.2021

VERBALE N. 2 – SEDUTA VERIFICA TITOLI

L'anno 2022, il giorno 9 del mese di Maggio, si è riunita utilizzando la piattaforma google meet, ciascun membro dalla propria sede universitaria, 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. 731/2022 del 08.03.2022 e composta da:

- Prof.ssa Angela Agostiano – professoressa ordinaria presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Bari (Presidente);
- Prof.ssa Elisa Borfecchia – professoressa associata presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Torino (componente);
- Prof. Luciano Galantini – professore ordinario presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza (Segretario);

Tutti i componenti della Commissione sono collegati per via telematica utilizzando la piattaforma google meet

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 14:00

Il Presidente informa la Commissione di aver acquisito l'elenco dei candidati ammessi con riserva alla procedura selettiva e la documentazione, in formato elettronico, trasmessa dagli stessi.

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 alla procedura selettiva risultano essere i seguenti:

1. BONASERA Aurelio
2. MANCINI Giordano
3. MIGLIORATI Valentina
4. TAVAGNACCO Letizia

La Commissione, quindi, procede ad esaminare le domande di partecipazione alla procedura presentate da parte dei 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 e le pubblicazioni trasmesse dal candidato.

Successivamente elenca, per ogni candidato, i titoli e le pubblicazioni valutabili (allegato B).

- | | |
|--|----------------------|
| 1) Vengono esaminati i titoli e le pubblicazioni del candidato | BONASERA Aurelio |
| 2) Vengono esaminati i titoli e le pubblicazioni del candidato | MANCINI Giordano |
| 4) Vengono esaminati i titoli e le pubblicazioni della candidata | MIGLIORATI Valentina |

5) Vengono esaminati i titoli e le pubblicazioni della candidata TAVAGNACCO Letizia

La Commissione termina i propri lavori alle ore 16:00 e si riconvoca per la verifica dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati, il giorno 9 maggio alle ore 16:15
Letto, confermato e sottoscritto.

Firma del Commissari

- Prof.ssa Angela Agostiano – (Presidente)
- Prof.ssa Elisa Borfecchia – (componente)
- Prof. Luciano Galantini – (Segretario);

ALLEGATO B AL VERBALE N. 2

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" BANDITA CON D.R. N. 3227/2021 DEL 02.12.2021

TITOLI E PUBBLICAZIONI VALUTABILI

CANDIDATO: BONASERA Aurelio

VERIFICA TITOLI VALUTABILI:

1. Laurea Magistrale in Chimica (classe Im/54) conseguita presso l'Università degli Studi di Messina. NON VALUTABILE perché non previsto da bando
2. Abilitazione all'esercizio alla professione di CHIMICO. NON VALUTABILE perché non previsto da bando
3. Borsa "Lifelong Learning Programme (LLP)" - Erasmus Placement spesa presso la Université de Mons – Laboratory for Chemistry of Novel Materials, Mons, Belgio. NON VALUTABILE perché non previsto da bando
4. Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze e Tecnologie Chimiche e Farmaceutiche conseguito presso l'Università degli Studi di Trieste. VALUTABILE
5. Borsa ITN Marie Skłodowska-Curie Actions "iSwitch" spesa presso la Humboldt-Universität zu Berlin - Institut für Chemie, Berlino, Germania. VALUTABILE
6. Attività di ricerca svolta in qualità di visiting researcher presso lo University College London - London Centre for Nanotechnology, Londra, Regno Unito. VALUTABILE
7. Contratto di collaborazione in qualità di visiting researcher presso la BASF SE, Ludwigshafen am Rhein, Germania. VALUTABILE
8. Partecipazione al network di ricerca ITN Marie Skłodowska-Curie Actions "iSwitch (Grant Agreement No. 642196) in qualità di Early-Stage Researcher. VALUTABILE
9. Incarico di ricercatore a tempo determinato di tipo A (RTD-A) presso l'Università degli Studi di Palermo – Dipartimento di Fisica e Chimica - Emilio Segrè, Palermo, Italia. VALUTABILE
10. Attività didattica svolta nel triennio 2013-2015 presso l'Università degli Studi di Trieste – Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Trieste, Italia. VALUTABILE
11. Attività didattica di supervisione del lavoro di studenti in laboratorio presso la Humboldt-Universität zu Berlin - Institut für Chemie, Berlino, Germania. VALUTABILE
12. Attività didattica svolta nel triennio 2019-2021 presso l'Università degli Studi di Palermo – Dipartimento di Fisica e Chimica - Emilio Segrè, Palermo, Italia. VALUTABILE
13. Attività congressuali negli ultimi cinque anni:
 - a. Partecipazione in qualità di relatore al "11th European - Winter School on Physical Organic Chemistry – E-WiSPOC", tenutosi a Bressanone (BZ), Italia. Contributo orale e poster. VALUTABILE
 - b. Partecipazione in qualità di relatore al "XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana - SCI2017", tenutosi a Paestum (SA), Italia. Contributo orale. VALUTABILE
 - c. Partecipazione in qualità di relatore al "XXII International Conference on Organic Synthesis - 22-ICOS", tenutosi a Firenze (FI), Italia. Contributo orale e poster. VALUTABILE
 - d. Partecipazione in qualità di relatore al "EastWest Chemistry Conference - EWCC 2019", tenutosi a Palermo (PA), Italia. Contributo orale e poster. VALUTABILE
 - e. Partecipazione in qualità di relatore al "Società Chimica Italiana - Workshop della Sezione Sicilia 2020", tenutosi su piattaforma virtuale. Poster. VALUTABILE

- f. Partecipazione in qualità di relatore al "Workshop Divisionale 2020 della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", tenutosi su piattaforma virtuale. Contributo orale. VALUTABILE
- g. Partecipazione in qualità di relatore al "XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana - SCI2021", tenutosi su piattaforma virtuale. Poster. VALUTABILE
14. Best Poster Award durante l'attività congressuale del 11th European Winter School on Physical Organic Chemistry. VALUTABILE
15. Finalista alla competizione StartCup UniPA 2019 presentando il business plan per il progetto Start-Up "Smart ZnO Nanoplatfoms for mesenchymAl cells TherApy (SONATA)". VALUTABILE
16. Pubblicazioni scientifiche non incluse nell'elenco delle 20 pubblicazioni utili ai fini della valutazione del candidato: NON VALUTABILI singolarmente ma considerati nella valutazione complessiva della produzione scientifica
- a. M. Milenković, A. Mišović, D. Jovanović, A. Popović Bijelić, G. Ciasca, S. Romanò, A. Bonasera, M. Mojsin, J. Pejić, M. Stevanović, S. Jovanović, "Facile Synthesis of L-Cysteine Functionalized Graphene Quantum Dots as a Bioimaging and Photosensitive Agent". *Nanomaterials* 2021, 11 (8), 1879
- b. S. Jovanović, S. Dorontić, D. Jovanović, G. Ciasca, M. Budimir, A. Bonasera, M. Scopelliti, O. Marković, B. Todorović-Marković, "Gamma irradiation of graphene quantum dots with ethylenediamine: Antioxidant for ion sensing". *Ceram. Int.* 2020, 46 (15), 23611-23622
- c. G. Arrabito, V. Ferrara, A. Bonasera, B. Pignataro, "Artificial Biosystem by Printing Biology". *Small* 2020, 1907691
- d. Z. Syrgiannis, A. Bonasera, E. Tenori, M. Prato, "Unravelling Radicals Reactivity Towards Carbon Nanotubes Manipulation/Functionalization". *Curr. Org. Chem.* 2016, 20 (6), 632-644
- e. F. Koutsianopoulos, A. Bonasera, S. Osella, R. Lazzaroni, Z. Syrgiannis, Y. Elemen, "Solvent-trap reaction of triazolinediones with simple alkenes: An experimental/theoretical study of thermodynamic and kinetic parameters". *Tetrahedron* 2015, 71 (50), 9474-9482
- f. J. Prekodravaca, Z. Markovića, S. Jovanovića, M. Budimira, D. Peruško, I. Holclajtner-Antunović, V. Pavlović, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, B. Todorović-Markovića "The effect of annealing temperature and time on synthesis of graphene thin films by rapid thermal annealing" *Synthetic Metals* 2015, 209, 461-467
- g. C. Hadad, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Prato "Efficient Microwave-Assisted Synthesis of PCBM Methanofullerenes (C60 and C70)" *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 1423-1427.

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1. G. Cotella, A. Bonasera,* G. Carnicella, A. Minotto, S. Hecht, F. Cacialli, "Diarylethenes in Optically Switchable Organic Light-Emitting Diodes: Direct Investigation of the Reversible Charge Carrier Trapping Process". *Adv. Opt. Mater.* 2021, 10 (2), 2101116. I.F. 9.926. VALUTABILE
2. G. Giuliano, A. Bonasera, G. Arrabito, B. Pignataro, "Semitransparent Perovskite Solar Cells for Building Integration and Tandem Photovoltaics: Design Strategies and Challenges". *Solar RRL* 2021, 5 (12), 2100702. I.F. 8.582. VALUTABILE
3. S. Dorontić, S. Jovanović, A. Bonasera,* "Shedding Light on Graphene Quantum Dots: Key Synthetic Strategies, Characterization Tools, and Cutting-Edge Applications". *Materials* 2021, 14 (20), 6153. I.F. 3.623. VALUTABILE
4. Y. Aleeva, V. Ferrara, A. Bonasera, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Superhydrophobic TiO₂/fluorinated polysiloxane hybrid coatings with controlled morphology for solar photocatalysis". *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* 2021, 631, 127633. I.F. 4.539. VALUTABILE
5. A. G. Gereanu, C. Sartorio, A. Bonasera, G. Giuliano, S. Cataldo, M. Scopelliti, G. Arrabito, B. Pignataro, "Pseudo-Planar Organic Heterojunctions by Sequential Printing of Quasi-Miscible Inks". *Coatings* 2021, 11 (5), 586. VALUTABILE
6. G. Giuliano, A. Bonasera, M. Scopelliti, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Boosting the Performance of One-Step Solution-Processed Perovskite Solar Cells Using a Natural Monoterpene Alcohol as a Green Solvent Additive". *ACS Appl. Electron. Mater.* 2021, 3 (4), 1813-1825. VALUTABILE

7. A. Bonasera,* G. Giuliano, G. Arrabito, B. Pignataro, "Tackling Performance Challenges in Organic Photovoltaics: An Overview about Compatibilizers". *Molecules* 2020, 25 (9), 2200. VALUTABILE
8. G. Ligorio, G. Cotella, A. Bonasera, N. Zorn Morales, G. Carnicella, B. Kobin, Q. Wang, N. Koch, S. Hecht, E. J. W. List-Kratochvil, F. Cacialli, "Modulating the luminance of organic light-emitting diodes via optical stimulation of a photochromic molecular monolayer at transparent oxide electrode". *Nanoscale* 2020, 12, 5444-5451. VALUTABILE
9. G. Arrabito, A. Bonasera, G. Prestopino, A. Orsini, A. Mattocchia, E. Martinelli, B. Pignataro, P. G. Medaglia, "Layered Double Hydroxides: A Toolbox for Chemistry and Biology". *Crystals* 2019, 9 (7), 361. VALUTABILE
10. S. Fredrich, A. Bonasera, V. Valderrey, S. Hecht, "Sensitive Assays by Nucleophile-Induced Rearrangement of Photoactivated Diarylethenes". *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140 (20), 6432-6440. VALUTABILE
11. F. Zhao, A. Bonasera, U. Nöchel, M. Behl, D. Bléger, "Reversible Modulation of Elasticity in Fluoroazobenzene-Containing Hydrogels Using Green and Blue Light". *Macromol. Rapid Commun.* 2017, 1700527. VALUTABILE
12. C.-Y. Huang, A. Bonasera, L. Hristov, Y. Garmshausen, B. M. Schmidt, D. Jacquemin, S. Hecht, "N,N'-Disubstituted Indigos as Readily Available Red-Light Photoswitches with Tunable Thermal Half-Lives". *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 15205-15211. VALUTABILE
13. V. Valderrey,† A. Bonasera,† S. Fredrich, S. Hecht, "Light-Activated Sensitive Probes for Amine Detection". *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 1914-1918. VALUTABILE
14. M. Herder, F. Eisenreich, A. Bonasera, A. Grafl, L. Grubert, M. Pätzelt, J. Schwarz, S. Hecht, "Light-Controlled Reversible Modulation of Frontier Molecular Orbital Energy Levels in Trifluoromethylated Diarylethenes". *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 3743-3754. VALUTABILE
15. E. Tenori, A. Colusso, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, S. Osella, A. Ostric, R. Lazzaroni, M. Meneghetti, M. Prato, "Perylene Derivatives As Useful SERRS Reporters, Including Multiplexing Analysis". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (51), 28042-28048. VALUTABILE
16. F. Ronconi, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Prato, R. Argazzi, S. Caramori, V. Cristino, C. A. Bignozzi, "Modification of Nanocrystalline WO₃ with a Dicationic Perylene Bisimide: Applications to Molecular Level Solar Water Splitting". *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137 (14), 4630-4633. VALUTABILE
17. F. Rigodanza, E. Tenori, A. Bonasera, Z. Syrgiannis, M. Prato, "Fast and Efficient Microwave-Assisted Synthesis of Perylenebisimides". *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 2015 (3), 5060-5063. VALUTABILE
18. S. Jovanović, Z. Syrgiannis, Z. Marković, A. Bonasera, D. Kepić, M. Budimir, D. Milivojević, V. Spasojević, M. Dramicanin, V. Pavlović, B. Todorović-Marković, "Modification of Structural and Luminescence Properties of Graphene Quantum Dots by Gamma Irradiation and Their Application in a Photodynamic Therapy". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (46), 25865-25874. VALUTABILE
19. Z. Syrgiannis, A. Bonasera, E. Tenori, V. La Parola, C. Hadad, M. Gruttadauria, F. Giacalone, M. Prato "Chemical modification of carbon nanomaterials (SWCNTs, DWCNTs, MWCNTs and SWCNHs) with diphenyl dichalcogenides": *Nanoscale*, 2015, 7, 6007. VALUTABILE
20. G. Modugno, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Carraro, G. Giancane, L. Valli, M. Bonchio, M. Prato "Supramolecular Design of Low-dimensional Carbon Nano-hybrids encoding a Polyoxometalate-bis-Pyrene Tweezer" *Chem. Commun.*, 2014,50, 4881-4883. VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato presenta una produzione complessiva pari a N. 27 pubblicazioni nell'intervallo temporale 2014 – 2021; un impact factor totale di 176.80, citazioni totali 474, citazioni medie per prodotto 17.56, H index 12.

CANDIDATO: MANCINI Giordano

VERIFICA TITOLI VALUTABILI:

1. Titolo di dottore di ricerca in Scienze Chimiche conseguito in data 08/02/2008 presso Università degli Studi di Roma "La Sapienza"; VALUTABILE (SOLO DICHIARATO NEGLI ALLEGATI A E B)
2. Contratto di ricercatore a tempo determinato di tipologia A stipulato ai sensi dell'art. 24, comma 3, lett. a) della legge 30 dicembre 2010, n. 240, presso Scuola Normale Superiore. dal 13/03/2013 al 29/12/2018. VALUTABILE (SOLO DICHIARATO NEGLI ALLEGATI A E B)
3. Assegno di ricerca presso Scuola Normale Superiore dal 13/03/2012 al 12/03/2013. VALUTABILE (SOLO DICHIARATO NEGLI ALLEGATI A E B)
4. Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore di seconda fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore concorsuale 03/A2 conseguita in data 10/04/2017, nella tornata 1532/2016. VALUTABILE

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1. Mancini, G.*; Fusè, M.; Lazzari, F.; Chandramouli, B.; Barone, V. Unsupervised Search of Low-Lying Conformers with Spectroscopic Accuracy: A Two-Step Algorithm Rooted into the Island Model Evolutionary Algorithm. *J. Chem. Phys.* 2020, 153 (12), 124110. Citazioni: 5 IF: 3.166. VALUTABILE
2. Mancini, G.*; Del Galdo, S.; Chandramouli, B.; Pagliai, M.; Barone, V. Computational Spectroscopy in Solution by Integration of Variational and Perturbative Approaches on Top of Clusterized Molecular Dynamics. *J. Chem. Theory Comput.* 2020, 16 (9), 5747–5761. Citazioni: 2. IF: 6.652. VALUTABILE
3. Lazzari, F.; Salvadori, A.; Mancini, G.*; Barone, V. Molecular Perception for Visualization and Computation: The Proxima Library. *J. Chem. Inf. Model.* 2020, acs.jcim.0c00076. Citazioni: 5 IF: 5.39. VALUTABILE
4. Busato, M.; Melchior, A.; Migliorati, V.; Colella, A.; Persson, I.; Mancini, G.; Veclani, D.; D'Angelo, P. Elusive Coordination of the Ag + Ion in Aqueous Solution: Evidence for a Linear Structure. *Inorg. Chem.* 2020, acs.inorgchem.0c02494. Citazioni: 5 IF: 4.815. VALUTABILE
5. Chandramouli, B.; Del Galdo, S.; Fusè, M.; Barone, V.; Mancini, G.* Two-Level Stochastic Search of Low-Energy Conformers for Molecular Spectroscopy: Implementation and Validation of MM and QM Models. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 10.1039.C9CP03557E. Citazioni: 12, IF: 3.802. VALUTABILE
6. Salvadori, A.; Fusè, M.; Mancini, G.*; Rampino, S.*; Barone, V. Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality: Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality. *Journal of Computational Chemistry* 2018. <https://doi.org/10.1002/jcc.25523>. Citazioni: 26. IF: 3.568. VALUTABILE
7. Sessa, F.; Migliorati, V.; Serva, A.; Lapi, A.; Aquilanti, G.; Mancini, G.; D'Angelo, P. On the Coordination of Zn 2+ Ion in Tf 2 N – Based Ionic Liquids: Structural and Dynamic Properties Depending on the Nature of the Organic Cation. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2018. <https://doi.org/10.1039/C7CP07497B>. Citazioni: 19. IF: 3.802. VALUTABILE
8. Fracchia, F.; Del Frate, G.; Mancini, G.; Rocchia, W.; Barone, V. Force Field Parametrization of Metal Ions From Statistical Learning Techniques. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00779>. Citazioni: 32. IF: 6.652. VALUTABILE
9. Salvadori, A.; Del Frate, G.; Pagliai, M.; Mancini, G.*; Barone, V. Immersive Virtual Reality in Computational Chemistry: Applications to the Analysis of QM and MM Data. *Int. J. Quantum Chem.* 2016, 116 (22), 1731–1746. <https://doi.org/10.1002/qua.25207>. Citazioni: 44 IF: 2.688. Cover article. VALUTABILE
10. Presti, D.; Pedone, A.; Mancini, G.*; Duce, C.; Tiné, M. R.; Barone, V. Insights into Structural and Dynamical Features of Water at Halloysite Interfaces Probed by DFT and Classical Molecular

- Dynamics Simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18 (3), 2164–2174. <https://doi.org/10.1039/C5CP05920H>. Citazioni: 19 IF: 3.802. VALUTABILE
11. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Sessa, F.; Mancini, G.; Persson, I. XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution. *The Journal of Physical Chemistry B* 2016, 120 (17), 4114–4124. <https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.6b01054>. Citazioni: 41. IF: 3.051. VALUTABILE
12. Pagliai, M.; Mancini, G.; Carnimeo, I.; De Mitri, N.; Barone, V. Electronic Absorption Spectra of Pyridine and Nicotine in Aqueous Solution with a Combined Molecular Dynamics and Polarizable QM/MM Approach. *J. Comput. Chem.* 2017, 38 (6), 319–335. <https://doi.org/10.1002/jcc.24683>. Citazioni: 25. IF: 3.568. VALUTABILE
13. Macchiagodena, M.; Mancini, G.* ; Pagliai, M.*; Barone, V. Accurate Prediction of Bulk Properties in Hydrogen Bonded Liquids: Amides as Case Studies. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. <https://doi.org/10.1039/C6CP04666E>. Citazioni: 27. IF: 3.802. VALUTABILE
14. Egidi, F.; Russo, R.; Camimeo, I.; D'Urso, A.; Mancini, G.; Cappelli, C. The Electronic Circular Dichroism of Nicotine in Aqueous Solution: A Test Case for Continuum and Explicit-Continuum Solvation Approaches. *The Journal of Physical Chemistry A* 2015, 150108134059007. <https://doi.org/10.1021/jp510542x>. Citazioni: 26 IF: 2.725. VALUTABILE
15. Mancini, G.* ; Zazza, C. F429 Regulation of Tunnels in Cytochrome P450 2B4: A Top Down Study of Multiple Molecular Dynamics Simulations. *PLOS ONE* 2015, 10 (9), e0137075. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0137075>. Citazioni: 10 IF: 3.788. VALUTABILE
16. Mancini, G.* ; Brancato, G.; Chandramouli, B.; Barone, V. Organic Solvent Simulations under Non-Periodic Boundary Conditions: A Library of Effective Potentials for the GLOB Model. *Chemical Physics Letters* 2015. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.03.001>. Citazioni: 11 IF: 1.999. VALUTABILE
17. Giachin, G.; Mai, P. T.; Tran, T. H.; Salzano, G.; Benetti, F.; Migliorati, V.; Arcovito, A.; Longa, S. D.; Mancini, G.; D'Angelo, P.; Legname, G. The Non-Octarepeat Copper Binding Site of the Prion Protein Is a Key Regulator of Prion Conversion. *Scientific Reports* 2015, 5, 15253. <https://doi.org/10.1038/srep15253>. Citazioni: 27 IF: 5.134. VALUTABILE
18. Mancini, G.* ; Brancato, G.*; Barone, V. Combining the Fluctuating Charge Method, Non-Periodic Boundary Conditions and Meta-Dynamics: Aqua Ions as Case Studies. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2014, 140221073102006. <https://doi.org/10.1021/ct400988e>. Citazioni: 22. IF: 6.652. VALUTABILE
19. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Persson, I.; Mancini, G.; Longa, S. D. Quantitative Analysis of Deconvolved X-Ray Absorption Near-Edge Structure Spectra: A Tool To Push the Limits of the X-Ray Absorption Spectroscopy Technique. *Inorganic Chemistry* 2014, 140829151720009. <https://doi.org/10.1021/ic501366d>. Citazioni: 7 IF: 4.185. VALUTABILE
20. Migliorati, V.; Mancini, G.; Tatoli, S.; Zitolo, A.; Filipponi, A.; De Panfilis, S.; Di Cicco, A.; D'Angelo, P. Hydration Properties of the Zn²⁺ Ion in Water at High Pressure. *Inorganic Chemistry* 2013, 52 (2), 1141–1150. <https://doi.org/10.1021/ic302530k>. Citazioni: 36. IF: 4.815. VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

Il candidato presenta una produzione complessiva pari a N. 76 pubblicazioni e 3 capitoli di libri; Impact factor totale 270,56; Impact factor medio 3,56; citazioni totali 1384; citazioni medie per prodotto 17,97; Hirsh index 25; corresponding author 12.

CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina

VERIFICA TITOLI VALUTABILI:

1. Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Fisica (settore concorsuale 03/A2 - Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche). Data conseguimento abilitazione: 03/08/2017. Allegato il giudizio della commissione nazionale. VALUTABILE

2. Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici). Data conseguimento abilitazione: 01/12/2014. Allegato il giudizio della commissione nazionale. VALUTABILE

3. Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici). Data conseguimento abilitazione: 07/08/2018. Allegato il giudizio della commissione nazionale. VALUTABILE

4. Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Fondamenti Chimici delle Tecnologie (settore concorsuale 03/B2). Data conseguimento abilitazione: 25/10/2018. VALUTABILE

5. Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito il 17/12/2009 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Titolo della tesi: A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration. Allegata la tesi di dottorato. VALUTABILE

6. Laurea in Chimica conseguita il 21/9/2006 presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" (voto 110/110 e lode). NON VALUTABILE

7. Dal 1/3/2010 al 30/11/2020 (con brevi periodi di interruzione specificati sotto): titolare di Assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Nel dettaglio:

- Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati". SSD: CHIM/02
Date inizio e fine dei contratti da assegnista:
 - 1) 01/03/2010-28/02/2011 VALUTABILE
 - 2) 01/03/2011-29/02/2012 VALUTABILE
 - 3) 01/03/2012-28/02/2013 VALUTABILE
 - 4) 01/03/2013-28/02/2014 VALUTABILE
 - 5) 01/03/2014-28/02/2015 VALUTABILE
- Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi". SSD: CHIM/02 VALUTABILE
Date inizio e fine dei contratti da assegnista:
 - 6) 01/03/2015-29/02/2016. VALUTABILE
 - 7) 01/03/2016-28/02/2017. VALUTABILE
 - 8) 01/03/2017-28/02/2018. VALUTABILE
- Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi statistici e chemiometrici per l'ottimizzazione di biomarcatori di latte vaccino e bufalino".
Date inizio e fine del contratto da assegnista:
 - 9) 01/03/2018-31/08/2019 (Nei periodi 27/6/2018-26/7/2018 e 8/1/2019-8/6/2019 il contratto è stato sospeso rispettivamente per gravidanza a rischio e maternità). VALUTABILE
- Progetto di ricerca: "Una nuova classe di solventi verdi: i solventi eutettici profondi". SSD: CHIM/02.
Date inizio e fine del contratto da assegnista:
 - 10) 01/12/2019-30/11/2020 VALUTABILE

8. Vincitrice di un posto di Ricercatore a tempo determinato di tipo A (RTDA) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza" (Bando n. 15/2020: RTD-A CHIM/02 - Prot. n. 1770 del 09.10.2020). Posizione attuale: RTD-A presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza" – SSD CHIM/02. Presa di servizio come RTD-A: 01/06/2021. VALUTABILE

9. Partecipazione a corsi di perfezionamento post-lauream:

- 9_1) Partecipazione al corso: "Understanding Molecular Simulations". 7-18 Gennaio 2008. Università di Amsterdam. Amsterdam. VALUTABILE
- 9_2) Partecipazione al corso: "Ottimizzazione di codici scientifico-tecnici." 17-19 Marzo 2009. CASPUR. Roma. VALUTABILE
- 9_3) Partecipazione al corso: "Introduzione all'HPC: calcolo parallelo". 12-14 Maggio 2009. CASPUR. Roma. VALUTABILE
- 9_4) Partecipazione al corso: "Scripting in Python". 25-28 Ottobre 2011. CASPUR. Roma. VALUTABILE

10. Partecipazione a congressi e workshops:

10_1) Partecipazione al "Terzo Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Zn²⁺ ion hydration under pressure". 18-19 Giugno 2008. Università "La Sapienza". Roma. VALUTABILE

10_2) Partecipazione al "XXXIII Congresso Nazionale della società Chimica Italiana". 5-10 Luglio 2009. Sorrento. VALUTABILE

10_3) Partecipazione alla "14th International Conference on X-ray Absorption Fine structure (XAFS14)". Presentazione di un contributo orale dal titolo "Ion Hydration in high-density water". 26-31 Luglio 2009. Camerino. VALUTABILE

10_4) Partecipazione al "CECAM workshop on Aqueous Solvation of Ions". Presentazione di un contributo orale dal titolo "A combined theoretical and experimental investigation of ion hydration". 22-24 Febbraio 2010. CECAM-ETHZ, Zurigo, Svizzera. VALUTABILE

10_5) Partecipazione all' "International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices - ILED-2" Presentazione di un poster dal titolo: "A combined Molecular Dynamics and X-ray diffraction study of protic ionic liquid/water mixtures" 09-11 Giugno 2010. Roma. VALUTABILE

10_6) Partecipazione al "Quarto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Studio strutturale e dinamico della coordinazione in acqua dello ione Br⁻". 16-17 Giugno 2010. Università "La Sapienza". Roma. VALUTABILE

10_7) Partecipazione al "Quinto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Effetto degli ioni Zn(2+) e Hg(2+) sulla struttura dell'acqua". 12-13 Giugno 2012. Università "La Sapienza". Roma. VALUTABILE

10_8) Partecipazione al "Sesto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Le funzioni di Wannier: uno sguardo su strutture e dinamiche nascoste". 17-18 Giugno 2014. Università "La Sapienza". Roma. VALUTABILE

10_9) Partecipazione al workshop: "Computer Simulations for Condensed Phase Systems: From Correlated Electrons to Novel Materials" 4-6 Maggio 2015. CNR. Roma. VALUTABILE

10_10) Partecipazione come Invited Speaker alla Conferenza internazionale "the EMN Bangkok Meeting on Materials 2015". Presentazione di una comunicazione orale su invito dal titolo: "Local Order and Long Range Correlations in Imidazolium Halide Ionic Liquids". 10-13 Novembre 2015, Bangkok, Thailandia. VALUTABILE

10_11) Partecipazione al "III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana". Presentazione di una comunicazione orale dal titolo: "The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs". 14-16 Dicembre 2015, Sede Centrale del CNR, Roma. VALUTABILE

10_12) Partecipazione alla conferenza "XXIV SILS (Società italiana luce di Sinctrotrone) meeting 2016" Presentazione di un poster dal titolo: "Unraveling the coordination geometry of Sc³⁺ in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule". 21-23 Settembre 2016. Università di Bari. Bari. VALUTABILE

10_13) Partecipazione al Congresso "IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana". Presentazione di un poster dal titolo: Sc³⁺ in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule". 3-5 Ottobre 2016. Scuola Normale Superiore. Pisa. VALUTABILE

10_14) Partecipazione al Congresso "XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana". Presentazione di un contributo orale dal titolo: "Unraveling the solvation properties of Lanthanide (3+) ions: a combined Molecular Dynamics and XAS approach". 1-4 Luglio 2019. Università "La Sapienza". Roma. VALUTABILE

10_15) Partecipazione al Congresso "XXVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana". Presentazione di un contributo orale dal titolo: Unraveling the solvation properties of Lanthanide (3+) ions: from molecular solvents to Ionic Liquid based systems. 14-23 Settembre 2021. Evento online. VALUTABILE

11. Attività didattica:

11_1) a.a. 2021/2022 (attualmente in corso) Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza" (6 CFU). VALUTABILE

11_2) a.a. 2020/2021 e 2021/2022 (attualmente in corso) Membro delle commissioni di laurea triennali e magistrali per il CAD in Chimica (L27 – LM54). VALUTABILE

11_3) a.a. 2020/2021 Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza" (6 CFU). VALUTABILE

11_4) a.a. 2019/2020 Corso di dottorato "Metodi computazionali per lo studio di sistemi molecolari complessi" per gli studenti del corso di dottorato in Scienze Chimiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza" (3 CFU). VALUTABILE

11_5) 2012-2018: Assistenza nella Supervisione di tesi di Laurea magistrale e triennale in chimica e nella supervisione di dottorandi di ricerca (in particolare di due dottorandi di ricerca, 5 lauree magistrali e 8 lauree triennali). VALUTABILE

11_6) a.a. 2007/2008, 2008/2009, 2009/2010, 2010/2011, 2011/2012, 2012/2013, 2013/2014, 2014/2015, 2015/2016, 2017/2018: Lezioni di Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II (MZ) (Il anno della Laurea triennale in Chimica – argomento del corso: Meccanica Quantistica) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE

11_7) a.a. 2006/2007: Contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico-integrative, propedeutiche e di recupero presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". VALUTABILE

12. Partecipazione scientifica a progetti di ricerca:

12_1) Responsabile scientifico del progetto per avvio alla ricerca Università La Sapienza 2015- prot. C26N159PNB. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "Unraveling halide hydration: the interplay of Car-Parrinello Molecular Dynamics and EXAFS spectroscopy." VALUTABILE

12_2) Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA. Anno: 2013-2014 - grant HP10CCQEUQ . Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in Ionic Liquids." 1070000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE

12_3) Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2015 - grant HP10C2Q0F3. Titolo: "Structure and properties of geminal dicationic Ionic Liquids/water mixtures." 1100000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE

12_4) Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2017 - grant HP10CZTDIS. Titolo: "Unraveling the peculiar properties of a new generation of green solvents: the deep eutectic solvents" 2100000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE

12_5) Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2018-2019 - grant HP10CGVY3L. Titolo: "Deep eutectic solvents: a combined theoretical and experimental study of the structural and dynamic properties" 400000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE

12_6) Responsabile scientifico del progetto per le risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2020 - grant HP10C7XQP3. Titolo: "Unveiling the nanostructure of aqueous and methanol mixtures of Deep Eutectic Solvents" 60000 ore calcolo assegnate. VALUTABILE

12_7) Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2010 - prot. C26A10H5T8. Fondi assegnati: 85.000 euro. Titolo: "PROTIC IONIC LIQUIDS: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques." VALUTABILE

12_8) Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2011- prot. C26A11SMBW. Fondi assegnati: 80.000 euro. Titolo: "The structure of metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies." VALUTABILE

12_9) Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2012 – prot. C26A129ZAY. Fondi assegnati: 64.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in task specific ionic liquids: a combined experimental and theoretical investigation." VALUTABILE

12_10) Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2013 – prot. C26A13K8AN. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in complex liquids: a combined XAS and MD investigation." VALUTABILE

12_11) Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2014 – prot. C26A14L7CX. Fondi assegnati: 50.000 euro. Titolo: "The role of metal ions in the prion conversion of different human prion protein variants." VALUTABILE

12_12) Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2015 - prot. C26H159F5B. Fondi assegnati: 30000 euro. Titolo: "Hydrogen Peroxide Activation by Non-Heme Iron Complexes: A Route for Sustainable and Selective Oxidation Processes." VALUTABILE

12_13) Partecipante al progetto di ricerca Università La Sapienza 2016 - Fondi assegnati: 36600 euro. Titolo: "Deep eutectic mixtures: a new generation of green solvents." VALUTABILE

13. Attività di Peer Review in qualità di Referee per diverse riviste scientifiche internazionali dell'American Chemical Society, dell'American Institute of Physics, e della Royal Society of Chemistry, tra le quali: Inorganic Chemistry, the Journal of Physical Chemistry, the Journal of Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Molecular Liquids, Catalysis Science & Technology, Nanoscale e Journal of Chemical Information and Modeling. VALUTABILE

14. Attività Editoriale nel 2020 per la rivista scientifica internazionale "Materials" pubblicata da MDPI. VALUTABILE

15. Incarichi Istituzionali:

15_1) 2011-2018: Rappresentante degli Assegnisti nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". NON VALUTABILE non previsti da bando

15_2) 2009: Rappresentante dei Dottorandi di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". NON VALUTABILE non previsti da bando

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1. V. Migliorati*, G. Fazio, S. Pollastri, A. Gentili, P. Tomai, F. Tavani, P. D'Angelo. Solubilization properties and structural characterization of dissociated HgO and HgCl₂ in deep eutectic solvents JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 329, 115505 (2021). journal IF: 6.165 citazioni: 4. VALUTABILE

2. V. Migliorati*, A. Gibiino, A. Lapi, M. Busato, P. D'Angelo. On the Coordination Chemistry of the lanthanum(III) Nitrate Salt in EAN/MeOH Mixtures INORGANIC CHEMISTRY 2021, 60, 10674–10685 (2021). journal IF:5.165 citazioni: 0. VALUTABILE

3. V. Migliorati*, A. Lapi, Paola D'Angelo. Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(III) bistriflimide salt in ionic liquid/acetonitrile mixtures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 22, 20434-20443 (2020). journal IF:3.676 citazioni: 3. VALUTABILE

4. V. Migliorati*, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019). journal IF: 3.430 citazioni: 5. VALUTABILE

5. V. Migliorati*, A. Caruso, Paola D'Angelo. Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825 citazioni: 6. VALUTABILE

6. F. Sessa, V. Migliorati*, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo. On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻- based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567 citazioni: 19. VALUTABILE

7. V. Migliorati*, A. Serva, F. Sessa, A. Lapi, P. D'Angelo. Influence of Counterions on the Hydration Structure of Lanthanide Ions in Dilute Aqueous Solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 122, 2779–2791 (2018). journal IF: 2.923 citazioni: 21. VALUTABILE

8. V. Migliorati*, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo. Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 7. VALUTABILE

9. V. Migliorati*, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo. Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 36. VALUTABILE
10. A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo. How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 23, 8424-8433 (2017). journal IF:5.160 citazioni: 16. VALUTABILE
11. V. Migliorati*, P. D'Angelo. Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016). journal IF: 4.857 citazioni: 22. VALUTABILE
12. A. Serva, V. Migliorati*, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). journal IF: 4.123 citazioni: 29. VALUTABILE
13. F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati*. The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015). journal IF: 3.187 citazioni: 20. VALUTABILE
14. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo. Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 33. VALUTABILE
15. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo. Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 30. VALUTABILE
16. V. Migliorati*, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). journal IF: 2.952 citazioni: 43. VALUTABILE
17. V. Migliorati*, P. D'Angelo. A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg²⁺ ion solvation properties in methanol solution RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). journal IF: 3.708 citazioni: 20. VALUTABILE
18. V. Migliorati*, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti. A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 40. VALUTABILE
19. V. Migliorati*, A. Zitolo, P. D'Angelo. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 48. VALUTABILE
20. P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati*. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 45. VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata presenta una produzione complessiva pari a N. 59 pubblicazioni e 2 capitoli di libri (intervallo temporale 2008-2021); Impact factor totale 220.81; Impact factor medio 3,74; citazioni totali 1548; citazioni medie per prodotto 26.24; Hirsh index 28.

CANDIDATA: TAVAGNACCO Letizia

VERIFICA TITOLI VALUTABILI:

1. Titolo Dottore di Ricerca: 27/03/2014 Life Science Department, University of Trieste, Italy Thesis: "How do water molecules probe and control bionanostructures and food functionalities". VALUTABILE
2. Appointment Cornell University 2010: 02/2010 - 09/2010 Undergraduate Researcher Department of Food Science, Lab. of Food Biophysics, Cornell University, US Research: Study of enzymes by atomistic simulations. NON VALUTABILE
3. Appointment Elettra Sincrotrone Trieste: CoCoPro_Elettra 2014. VALUTABILE
4. Borsa di Studio Federchimica: 10/2014 - 09/2015 Department of Chemical and Pharmaceutical Sciences, University of Trieste, Italy, Advisor: Prof A. Cesàro, Research: Study of self-assembly of biomolecules by atomistic simulations and neutron spectroscopy. VALUTABILE
5. Postdoctoral Research Associate Cornell University: 11/2015 - 03/2016 Department of Food Science, Lab. of Food Biophysics, Cornell University, US Postdoctoral Research Associate Advisor: Prof J. W. Brady Research: Study of self-assembly of biomolecules by atomistic simulations and neutron spectroscopy. VALUTABILE
6. Assegnista di Ricerca CNR-ISC: 03/2017 - 12/2019 CNR-ISC c/o Department of Physics, Sapienza University of Rome, Italy; Assegnista di Ricerca; Advisor: Dr. Emanuela Zaccarelli Research: Study of microgels in aqueous solutions by atomistic simulations. VALUTABILE
7. Ricercatore a tempo determinato (III livello) CNR-ISC: 01/2020 – now; CNR-ISC c/o Department of Physics, Sapienza University of Rome, Italy; Ricercatore (III livello) a tempo determinate; Advisor: Dr. Emanuela Zaccarelli; Research: Study of microgels in aqueous solutions by atomistic simulations. VALUTABILE

VERIFICA PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1. L. Tavagnacco, G. Corucci, Y. Gerelli Interaction of caffeine with model lipid membranes J. Phys. Chem. B., 2021, 125, 10174-10181, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c04360. Journal IF: 2.991 Citations: 1. VALUTABILE
2. G. Del Monte, D. Truzzolillo, F. Camerin, A. Ninarello, E. Chauveau, L. Tavagnacco, N. Gnan, L. Rovigatti, S. Sennato, E. Zaccarelli Two-step deswelling in the Volume Phase Transition of thermoresponsive microgels PNAS, 2021, 118, e2109560118, DOI: 10.1073/pnas.2109560118. Journal IF: 11.205 Citations: 1. VALUTABILE
3. B. P. Rosi#, L. Tavagnacco#, L. Comez, P. Sassi, M. Ricci, E. Buratti, M. Bertoldo, C. Petrillo, E. Zaccarelli, E. Chiessi, S. Corezzi Thermoresponsivity of poly(N-isopropylacrylamide) microgels in water-trehalose solution and its relation to protein behavior J. Colloid Interface Sci., 2021, 604, 705-718, DOI: 10.1016/j.jcis.2021.07.006. Journal IF: 8.128 Citations: 1. VALUTABILE
4. L. Tavagnacco, E. Chiessi, E. Zaccarelli Molecular insights on Poly(N-isopropylacrylamide) coil-to-globule transition induced by pressure Phys. Chem. Chem. Phys., 2021, 23, 5984-5991, DOI: 10.1039/D0CP06452A. Journal IF: 3.676 Citations: 3. VALUTABILE
5. L. Tavagnacco, M. Zanatta, E. Buratti, B. Rosi, B. Frick, F. Natali, J. Ollivier, E. Chiessi, M. Bertoldo, E. Zaccarelli, A. Orecchini Proteinlike dynamical transition of hydrated polymer chains Phys. Rev. Research, 2021, 3, 013191, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013191. Journal IF: not available Citations: 2. VALUTABILE
6. M. Zanatta, L. Tavagnacco*, E. Buratti, E. Chiessi, F. Natali, M. Bertoldo, A. Orecchini, E. Zaccarelli Atomic scale investigation of the volume phase transition in concentrated PNIPAM Microgels J. Chem. Phys., 2020, 152, 204904, DOI: 10.1063/5.0007112. Journal IF: 3.488 Citations: 3. VALUTABILE
7. L. Tavagnacco, E. Zaccarelli, E. Chiessi Molecular description of the coil-to-globule transition of Poly (N-isopropylacrylamide) in water/ethanol mixture at low alcohol concentration J. Mol. Liq,

- 2020, 297, 111928, DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111928. Journal IF: 6.165 Citations: 14. VALUTABILE
8. P. E. Mason, L. Tavagnacco, M.-L. Saboungi, T. Hansen, H. E. Fischer, G. W. Neilson, T. Ichiye and J. W. Brady Molecular Dynamics and Neutron Scattering Studies of Potassium Chloride in Aqueous Solution *J. Phys. Chem. B*, 2019, 123, 10807-10813, DOI:10.1021/acs.jpcc.9b08422 Journal IF: 2.991 Citations: 1. VALUTABILE
9. L. Tavagnacco, E. Chiessi, M. Zanatta, A. Orecchini and E. Zaccarelli Water-Polymer Coupling Induces a Dynamical Transition in Microgels *J. Phys. Chem. Lett.*, 2019, 10, 870-876, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b00190. Journal IF: 6.475 Citations: 16. VALUTABILE
10. S. Di Fonzo, C. Bottari, J. W. Brady, L. Tavagnacco, M. Caterino, L. Petraccone, J. Amato, C. Giancola and A. Cesaro Crowding and conformation interplay on human DNA G-quadruplex by ultraviolet resonant Raman scattering *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 2093-2101, DOI: 10.1039/C8CP04728F. Journal IF: 3.676 Citations: 9. VALUTABILE
11. L. Rovigatti, N. Gnan, L. Tavagnacco, A. J. Moreno and E. Zaccarelli Numerical modelling of non-ionic microgels: an overview *Soft matter*, 2019, 15, 1108-1119, DOI:10.1039/C8SM02089B. Journal IF: 3.679 Citations: 49. VALUTABILE
12. M. Zanatta#, L. Tavagnacco#, E. Buratti#, M. Bertoldo, F. Natali, E. Chiessi, A. Orecchini and E. Zaccarelli Evidence of a low-temperature dynamical transition in concentrated microgels *Sci. Adv.*, 2018, 4, eaat5895, DOI: 10.1126/sciadv.aat5895. Journal IF: 14.143 Citations: 18. VALUTABILE
13. L. Tavagnacco*, E. Zaccarelli and E. Chiessi On the Molecular Origin of the Cooperative Coil-to-globule Transition of Poly(N-isopropylacrylamide) in Water *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 9997-10010, DOI: 10.1039/C8CP00537K. Journal IF: 3.676 Citations: 55. VALUTABILE
14. L. Tavagnacco, P. E. Mason, G. W. Neilson, M.-L. Saboungi, A. Cesaro and J. W. Brady Molecular dynamics and neutron scattering studies of mixed solutions of caffeine and pyridine in water *J. Phys. Chem. B.*, 2018, 122, 5308-5315, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b07798. Journal IF: 2.991 Citations: 5. VALUTABILE
15. B. Bellich, S. Di Fonzo, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, C. Masciovecchio, F. Bertolotti, G. Giannini, R. De Zorzi, S. Geremia, A. Maiocchi, F. Uggeri, N. Masciocchi and A. Cesaro Myelography iodinated contrast media. II. Conformational versatility of iopamidol in the solid State *Mol. Pharmaceutics*, 2017, 14, 468-477, DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.6b00902. Journal IF: 4.939 Citations: 5. VALUTABILE
16. L. Tavagnacco, Y. Gerelli, A. Cesaro and J. W. Brady Stacking and branching in self-aggregation of caffeine in aqueous solution: from the supramolecular to atomic scale clustering *J. Phys. Chem. B*, 2016, 120, 9987-9996, DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06980. Journal IF: 2.991 Citations: 12. VALUTABILE
17. L. Tavagnacco, S. Di Fonzo, F. D'Amico, C. Masciovecchio, J. W. Brady and A. Cesaro Stacking of purines in water: the role of dipolar interaction in caffeine *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 13478-13486, DOI: 10.1039/C5CP07326J. Journal IF: 3.676 Citations: 20. VALUTABILE
18. L. Tavagnacco, J. W. Brady, F. Bruni, S. Callear, M.A. Ricci, M.-L. Saboungi and A. Cesaro Hydration of caffeine at high temperature by neutron scattering and simulation studies *J. Phys. Chem. B*, 2015, 119, 13294-13301, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09204. Journal IF: 2.991 Citations: 21. VALUTABILE
19. L. Fontanive, N. D'Amelio, A. Cesaro, A. Gamini, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, J. W. Brady, A. Maiocchi and F. Uggeri Myelography iodinated contrast media. I. Unraveling the atropisomerism properties in solution *Mol. Pharmaceutics*, 2015, 12, 1939-1950, DOI:10.1021/mp5007486. Journal IF: 4.939 Citations: 52. VALUTABILE

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

La candidata presenta una produzione complessiva pari a N. 24 pubblicazioni (intervallo temporale 2011-2022); Impact factor totale 105.75; Impact factor medio 4.41; citazioni totali 374; citazioni medie per prodotto 15.58; Hirsh index 12.

Letto, confermato e sottoscritto.

Firma del Commissari

- Prof.ssa Angela Agostiano – (Presidente)
- Prof.ssa Elisa Borfecchia – (Componente)
- Prof. Luciano Galantini – (Segretario);

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" BANDITA CON D.R. N. 3227/2021 DEL 02.12.2021

VERBALE N. 3 – SEDUTA VALUTAZIONE TITOLI

L'anno 2022, il giorno 9 del mese di Maggio, si è riunita utilizzando la piattaforma google meet, ciascun membro dalla propria sede universitaria, 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. 731/2022 del 08.03.2022 e composta da:

- Prof.ssa Angela Agostiano – professoressa ordinaria presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Bari (Presidente);
- Prof.ssa Elisa Borfecchia – professoressa associata presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Torino (componente);
- Prof. Luciano Galantini – professore ordinario presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza (Segretario);

Tutti i componenti della Commissione sono collegati per via telematica utilizzando la piattaforma google meet

La Commissione, presa visione dell'elenco dei candidati e delle rinunce sino ad ora pervenute, prende atto che i candidati da valutare ai fini della procedura sono n. 4, e precisamente:

1. BONASERA Aurelio
2. MANCINI Giordano
3. MIGLIORATI Valentina
4. TAVAGNACCO Letizia

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.

I giudizi dei singoli commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (all. D).

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

1. BONASERA Aurelio
2. MANCINI Giordano
3. MIGLIORATI Valentina
4. TAVAGNACCO Letizia

Il colloquio si terrà il giorno 31 maggio 2022, alle ore 9:30 per via telematica attraverso la piattaforma google meet al seguente link <https://meet.google.com/jbr-dcka-ver?hs=122&authuser=0>

La Commissione termina i propri lavori alle ore 22:15 e si riconvoca il giorno 31 maggio 2022.
alle ore 9:15

Letto, confermato e sottoscritto.

Firma del Commissari

- Prof.ssa Angela Agostiano – (Presidente)
- Prof.ssa Elisa Borfecchia – (Componente)
- Prof. Luciano Galantini – (Segretario);

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

PROCEDURA SELETTIVA DI CHIAMATA PER N. 1 POSTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI TIPOLOGIA B PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 - SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA "LA SAPIENZA" BANDITA CON D.R. N. 3227/2021 DEL 02.12.2021

L'anno 2022, il giorno 9 del mese di Maggio, si è riunita utilizzando la piattaforma google meet, ciascun membro dalla propria sede universitaria, 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. 731/2022 del 08.03.2022 e composta da:

- Prof.ssa Angela Agostiano – professoressa ordinaria presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Bari (Presidente);
- Prof.ssa Elisa Borfecchia – professoressa associata presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Torino (componente);
- Prof. Luciano Galantini – professore ordinario presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza (Segretario);

Tutti i componenti della Commissione sono collegati per via telematica utilizzando la piattaforma google meet

La Commissione inizia i propri lavori alle ore 16:15 e procede ad elaborare la valutazione individuale e collegiale dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati.

CANDIDATO: BONASERA Aurelio

COMMISSARIO 1

TITOLI

Il candidato Aurelio BONASERA ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze e Tecnologie Chimiche e Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Trieste nel 2015. Ha successivamente ricoperto il ruolo di Early-Stage Researcher all'interno in un network di ricerca ITN Marie Skłodowska-Curie Actions, prima di essere assunto nel 2019 Ricercatore a tempo determinato di tipo A. Nel periodo 2013-2016 ha collaborato ad attività didattiche legate al "Piano per le Lauree Scientifiche" e ha svolto attività di supporto di laboratorio per insegnamenti di Chimica Fisica A partire dal 2020 è stato docente di un modulo di laboratorio di un corso di Chimica Fisica e ha svolto attività di docenza all'interno di un Master. Il candidato ha partecipato a numerosi congressi e workshop soprattutto a livello nazionale, con contributi orali e poster. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce una attività di ricerca e di didattica molto buona e continua

Il giudizio complessivo sui titoli è: MOLTO BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. G. Cotella, A. Bonasera,* G. Carnicella, A. Minotto, S. Hecht, F. Cacialli, "Diarylethenes in Optically Switchable Organic Light-Emitting Diodes: Direct Investigation of the Reversible Charge Carrier Trapping Process". Adv. Opt. Mater. 2021, 10 (2),2101116. I.F. 9.926.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è ottima. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, essendo corresponding author.

2. G. Giuliano, A. Bonasera, G. Arrabito, B. Pignataro, "Semitransparent Perovskite Solar Cells for Building Integration and Tandem Photovoltaics: Design Strategies and Challenges". Solar RRL 2021, 5 (12), 2100702. I.F. 8.582.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona.

3. S. Dorončić, S. Jovanović, A. Bonasera,* "Shedding Light on Graphene Quantum Dots: Key Synthetic Strategies, Characterization Tools, and Cutting-Edge Applications". Materials 2021, 14 (20), 6153. I.F. 3.623.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente.

4. Y. Aleeva, V. Ferrara, A. Bonasera, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Superhydrophobic TiO₂/fluorinated polysiloxane hybrid coatings with controlled morphology for solar photocatalysis". Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp. 2021, 631, 127633. I.F. 4.539.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

5. A. G. Gereanu, C. Sartorio, A. Bonasera, G. Giuliano, S. Cataldo, M. Scopelliti, G. Arrabito, B. Pignataro, "Pseudo-Planar Organic Heterojunctions by Sequential Printing of Quasi-Miscible Inks". Coatings 2021, 11 (5), 586. I.F. 2.881.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta.

6. G. Giuliano, A. Bonasera, M. Scopelliti, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Boosting the Performance of One-Step Solution-Processed Perovskite Solar Cells Using a Natural Monoterpene Alcohol as a Green Solvent Additive". ACS Appl. Electron. Mater. 2021, 3 (4), 1813-1825. I.F. 3.314.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

7. A. Bonasera,* G. Giuliano, G. Arrabito, B. Pignataro, "Tackling Performance Challenges in Organic Photovoltaics: An Overview about Compatibilizers". Molecules 2020, 25 (9), 2200. I.F. 4.41.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

8. G. Ligorio, G. Cotella, A. Bonasera, N. Zorn Morales, G. Carnicella, B. Kobin, Q. Wang, N. Koch, S. Hecht, E. J. W. List-Kratochvil, F. Cacialli, "Modulating the luminance of organic light-emitting diodes via optical stimulation of a photochromic molecular monolayer at transparent oxide electrode". Nanoscale 2020, 12, 5444-5451. I.F. 7.790.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona.

9. G. Arrabito, A. Bonasera, G. Prestopino, A. Orsini, A. Mattocchia, E. Martinelli, B. Pignataro, P. G. Medaglia, "Layered Double Hydroxides: A Toolbox for Chemistry and Biology". Crystals 2019, 9 (7), 361. I.F. 2.404.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta.

10. S. Fredrich, A. Bonasera, V. Valderrey, S. Hecht, "Sensitive Assays by Nucleophile-Induced Rearrangement of Photoactivated Diarylethenes". *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140 (20), 6432-6440. I.F. 14.695.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

11. F. Zhao, A. Bonasera, U. Nöchel, M. Behl, D. Bléger, "Reversible Modulation of Elasticity in Fluoroazobenzene-Containing Hydrogels Using Green and Blue Light". *Macromol. Rapid Commun.* 2017, 1700527. I.F. 4.441.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona,.

12. C.-Y. Huang, A. Bonasera, L. Hristov, Y. Garmshausen, B. M. Schmidt, D. Jacquemin, S. Hecht, "N,N'-Disubstituted Indigos as Readily Available Red-Light Photoswitches with Tunable Thermal Half-Lives". *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 15205-15211. I.F. 14.357.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente.

13. V. Valderrey, A. Bonasera, S. Fredrich, S. Hecht, "Light-Activated Sensitive Probes for Amine Detection". *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 1914-1918. I.F. 12.102.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente.

14. M. Herder, F. Eisenreich, A. Bonasera, A. Grafl, L. Grubert, M. Pätzelt, J. Schwarz, S. Hecht, "Light-Controlled Reversible Modulation of Frontier Molecular Orbital Energy Levels in Trifluoromethylated Diarylethenes". *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 3743-3754. I.F. 5.175.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

15. E. Tenori, A. Colusso, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, S. Osella, A. Ostric, R. Lazzaroni, M. Meneghetti, M. Prato, "Perylene Derivatives As Useful SERRS Reporters, Including Multiplexing Analysis". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (51), 28042-28048. I.F. 7.145.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona.

16. F. Ronconi, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Prato, R. Argazzi, S. Caramori, V. Cristino, C. A. Bignozzi, "Modification of Nanocrystalline WO₃ with a Dicationic Perylene Bisimide: Applications to Molecular Level Solar Water Splitting". *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137 (14), 4630-4633. I.F. 13.038.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente.

17. F. Rigodanza, E. Tenori, A. Bonasera, Z. Syrgiannis, M. Prato, "Fast and Efficient Microwave-Assisted Synthesis of Perylenebisimides". *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 2015 (3), 5060-5063. I.F. 3.068.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona..

18. S. Jovanović, Z. Syrgiannis, Z. Marković, A. Bonasera, D. Kepić, M. Budimir, D. Milivojević, V. Spasojević, M. Dramicanin, V. Pavlović, B. Todorović-Marković, "Modification of Structural and Luminescence Properties of Graphene Quantum Dots by Gamma Irradiation and Their Application in a Photodynamic Therapy". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (46), 25865-25874. I.F. 7.105.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona.

19. Z. Syrgiannis, A. Bonasera, E. Tenori, V. La Parola, C. Hadad, M. Gruttadauria, F. Giacalone, M. Prato "Chemical modification of carbon nanomaterials (SWCNTs, DWCNTs, MWCNTs and SWCNHs) with diphenyl dichalcogenides" : *Nanoscale*, 2015, 7, 6007. I.F. 7.706.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona.

20. G. Modugno, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Carraro, G. Giancane, L. Valli, M. Bonchio, M. Prato "Supramolecular Design of Low-dimensional Carbon Nano-hybrids encoding a Polyoxometalate-bis-Pyrene Tweezer" *Chem. Commun.*, 2014,50, 4881-4883. I.F. 6.834.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono in larga parte coerenti con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale molto (impact factor medio 7.157). Le 20 pubblicazioni scelte sono prevalentemente nel campo della preparazione e caratterizzazione di sistemi innovativi per applicazioni nel campo della optoelettronica e delle celle solari. Il contributo del candidato nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 2 delle 20 pubblicazioni selezionate e dalla sua collocazione come corresponding author in 3 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è generalmente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra una produttività scientifica alta (27 pubblicazioni in 8 anni), continua nel tempo e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 6.55, un numero di citazioni medie per prodotto di 17.56, e un H index pari a 12. L'apporto fornito dal candidato è testimoniato da un discreto numero di articoli in cui è presente come primo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

COMMISSARIO 2

TITOLI

Il candidato Aurelio BONASERA ha ottenuto il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze e Tecnologie Chimiche e Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Trieste, partecipando poi nel ruolo di "Early-Stage Researcher" al network MSCA-ITN "iSwitch" nel periodo 2015–2018. Successivamente, ha prestato servizio nel ruolo di ricercatore a tempo determinato di tipo A presso l'Università degli Studi di Palermo. L'attività didattica dal candidato include: collaborazioni didattiche nell'ambito del "Piano per le Lauree Scientifiche" ed a supporto di insegnamenti in ambito Chimico; docenza per un modulo di laboratorio di un corso di Chimica Fisica, collaborazione per svolgimento di attività didattiche a supporto di altri insegnamenti di Chimica Fisica; docenza nell'ambito di un Master. Il candidato ha preso parte ad un buon numero di congressi e workshop pertinenti al settore scientifico di riferimento presentando contributi di tipo orale e poster. Alla luce dell'analisi dei titoli presentati, il profilo curricolare del candidato risulta molto buono sia per ciò che concerne la continuità temporale dell'attività di ricerca, sia in relazione all'attività didattica svolta.

Il giudizio complessivo sui titoli è: MOLTO BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. G. Cotella, A. Bonasera,* G. Carnicella, A. Minotto, S. Hecht, F. Cacialli, "Diarylethenes in Optically Switchable Organic Light-Emitting Diodes: Direct Investigation of the Reversible Charge Carrier Trapping Process". *Adv. Opt. Mater.* 2021, 10 (2), 2101116. I.F. 9.926.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta ottima. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente.

2. G. Giuliano, A. Bonasera, G. Arrabito, B. Pignataro, "Semitransparent Perovskite Solar Cells for Building Integration and Tandem Photovoltaics: Design Strategies and Challenges". *Solar RRL* 2021, 5 (12), 2100702. I.F. 8.582.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona.

3. S. Dorontić, S. Jovanović, A. Bonasera,* "Shedding Light on Graphene Quantum Dots: Key Synthetic Strategies, Characterization Tools, and Cutting-Edge Applications". *Materials* 2021, 14 (20), 6153. I.F. 3.623.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

4. Y. Aleeva, V. Ferrara, A. Bonasera, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Superhydrophobic TiO₂/fluorinated polysiloxane hybrid coatings with controlled morphology for solar photocatalysis". *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* 2021, 631, 127633. I.F. 4.539.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

5. A. G. Gereanu, C. Sartorio, A. Bonasera, G. Giuliano, S. Cataldo, M. Scopelliti, G. Arrabito, B. Pignataro, "Pseudo-Planar Organic Heterojunctions by Sequential Printing of Quasi-Miscible Inks". *Coatings* 2021, 11 (5), 586. I.F. 2.881.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta.

6. G. Giuliano, A. Bonasera, M. Scopelliti, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Boosting the Performance of One-Step Solution-Processed Perovskite Solar Cells Using a Natural Monoterpene Alcohol as a Green Solvent Additive". *ACS Appl. Electron. Mater.* 2021, 3 (4), 1813-1825. I.F. 3.314.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

7. A. Bonasera,* G. Giuliano, G. Arrabito, B. Pignataro, "Tackling Performance Challenges in Organic Photovoltaics: An Overview about Compatibilizers". *Molecules* 2020, 25 (9), 2200. I.F. 4.41.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

8. G. Ligorio, G. Cotella, A. Bonasera, N. Zorn Morales, G. Carnicella, B. Kobin, Q. Wang, N. Koch, S. Hecht, E. J. W. List-Kratochvil, F. Cacialli, "Modulating the luminance of organic light-emitting diodes via optical stimulation of a photochromic molecular monolayer at transparent oxide electrode". *Nanoscale* 2020, 12, 5444-5451. I.F. 7.790.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona.

9. G. Arrabito, A. Bonasera, G. Prestopino, A. Orsini, A. Mattocchia, E. Martinelli, B. Pignataro, P. G.

Medaglia, "Layered Double Hydroxides: A Toolbox for Chemistry and Biology". *Crystals* 2019, 9 (7), 361. I.F. 2.404.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta.

10. S. Fredrich, A. Bonasera, V. Valderrey, S. Hecht, "Sensitive Assays by Nucleophile-Induced Rearrangement of Photoactivated Diarylethenes". *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140 (20), 6432-6440. I.F. 14.695.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta eccellente.

11. F. Zhao, A. Bonasera, U. Nöchel, M. Behl, D. Bléger, "Reversible Modulation of Elasticity in Fluoroazobenzene-Containing Hydrogels Using Green and Blue Light". *Macromol. Rapid Commun.* 2017, 1700527. I.F. 4.441.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

12. C.-Y. Huang, A. Bonasera, L. Hristov, Y. Garmshausen, B. M. Schmidt, D. Jacquemin, S. Hecht, "N,N'-Disubstituted Indigos as Readily Available Red-Light Photoswitches with Tunable Thermal Half-Lives". *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 15205-15211. I.F. 14.357.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta eccellente.

13. V. Valderrey, A. Bonasera, S. Fredrich, S. Hecht, "Light-Activated Sensitive Probes for Amine Detection". *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 1914-1918. I.F. 12.102.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta eccellente.

14. M. Herder, F. Eisenreich, A. Bonasera, A. Grafl, L. Grubert, M. Pätzelt, J. Schwarz, S. Hecht, "Light-Controlled Reversible Modulation of Frontier Molecular Orbital Energy Levels in Trifluoromethylated Diarylethenes". *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 3743-3754. I.F. 5.175.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

15. E. Tenori, A. Colusso, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, S. Osella, A. Ostric, R. Lazzaroni, M. Meneghetti, M. Prato, "Perylene Derivatives As Useful SERRS Reporters, Including Multiplexing Analysis". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (51), 28042-28048. I.F. 7.145.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona.

16. F. Ronconi, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Prato, R. Argazzi, S. Caramori, V. Cristino, C. A. Bignozzi, "Modification of Nanocrystalline WO₃ with a Dicationic Perylene Bisimide: Applications to Molecular Level Solar Water Splitting". *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137 (14), 4630-4633. I.F. 13.038.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta eccellente.

17. F. Rigodanza, E. Tenori, A. Bonasera, Z. Syrgiannis, M. Prato, "Fast and Efficient Microwave-Assisted Synthesis of Perylenebisimides". *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 2015 (3), 5060-5063. I.F. 3.068.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

18. S. Jovanović, Z. Syrgiannis, Z. Marković, A. Bonasera, D. Kepić, M. Budimir, D. Milivojević, V. Spasojević, M. Dramicanin, V. Pavlović, B. Todorović-Marković, "Modification of Structural and Luminescence Properties of Graphene Quantum Dots by Gamma Irradiation and Their Application in a Photodynamic Therapy". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (46), 25865-25874. I.F. 7.105.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona.

19. Z. Syrgiannis, A. Bonasera, E. Tenori, V. La Parola, C. Hadad, M. Gruttadauria, F. Giacalone, M. Prato "Chemical modification of carbon nanomaterials (SWCNTs, DWCNTs, MWCNTs and SWCNHs) with diphenyl dichalcogenides" : *Nanoscale*, 2015, 7, 6007. I.F. 7.706.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona.

20. G. Modugno, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Carraro, G. Giancane, L. Valli, M. Bonchio, M. Prato "Supramolecular Design of Low-dimensional Carbon Nano-hybrids encoding a Polyoxometalate-bis-Pyrene Tweezer" *Chem. Commun.*, 2014,50, 4881-4883. I.F. 6.834.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione risultano coerenti con il SSD di riferimento e sono in media pubblicate su riviste caratterizzate da una collocazione editoriale da molto buona ad eccellente. Le pubblicazioni evidenziano elevata originalità, innovatività e rigore metodologico, su tematiche di ricerca inerenti la sintesi e caratterizzazione di sistemi foto-attivi e materiali funzionali per applicazioni in fotocatalisi e celle solari. Il contributo individuale del candidato risulta discreto, come dimostrato dal ruolo di primo o ultimo autore in 2 delle 20 pubblicazioni e dal ruolo di autore corrispondente in 3 delle 20 pubblicazioni.

La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica complessiva del candidato è generalmente coerente con il SSD CHIM/02. La produttività scientifica è elevata (27 pubblicazioni nel periodo 2014 – 2021) e di qualità molto buona, sulla base dell'I.F. medio (6.55) e del n° di citazioni medie (17.56) per pubblicazione, nonché dell'H-index pari a 12. Il contributo individuale del candidato si evince da un discreto numero di lavori pubblicati nel ruolo di primo autore o autore corrispondente.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

COMMISSARIO 3

TITOLI

Il candidato Aurelio BONASERA ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze e Tecnologie Chimiche e Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Trieste in data 30.04.2015. Il candidato ha successivamente ricoperto il ruolo di Early-Stage Researcher all'interno del network di ricerca ITN Marie Skłodowska-Curie Actions "iSwitch" (Grant Agreement No. 642196), nel triennio 2015 – 2018, prima di essere assunto nel 2019, presso l'Università degli Studi di Palermo, in qualità di ricercatore a tempo determinato di tipo A. Nel periodo 2013-2016 ha collaborato ad attività didattiche legate al "Piano per le Lauree Scientifiche" e a supporto degli insegnamenti universitari di Chimica. A partire dal 2020 è stato docente di un modulo di laboratorio di un corso di Chimica Fisica, ha collaborato allo svolgimento di attività didattiche di laboratorio a supporto di altri insegnamenti di Chimica Fisica ed ha anche svolto attività di docenza all'interno di un Master. Il candidato ha partecipato a numerosi congressi e workshop con contributi orali e poster (11th European - Winter School on Physical Organic Chemistry – E-WiSPOC, XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana - SCI2017, XXII International Conference on Organic Synthesis - 22-ICOS, EastWest Chemistry Conference - EWCC 2019, Società Chimica Italiana - Workshop della Sezione Sicilia 2020, Workshop Divisionale 2020 della Divisione di Chimica Fisica

della Società Chimica Italiana, XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana - SCI2021). L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di livello molto buono per quanto riguarda la continuità temporale dell'attività di ricerca e per l'attività didattica svolta.

Il giudizio complessivo sui titoli è: MOLTO BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. G. Cotella, A. Bonasera,* G. Carnicella, A. Minotto, S. Hecht, F. Cacialli, "Diarylethenes in Optically Switchable Organic Light-Emitting Diodes: Direct Investigation of the Reversible Charge Carrier Trapping Process". *Adv. Opt. Mater.* 2021, 10 (2), 2101116. I.F. 9.926.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è ottima, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione come corresponding author.

2. G. Giuliano, A. Bonasera, G. Arrabito, B. Pignataro, "Semitransparent Perovskite Solar Cells for Building Integration and Tandem Photovoltaics: Design Strategies and Challenges". *Solar RRL* 2021, 5 (12), 2100702. I.F. 8.582.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

3. S. Dorontić, S. Jovanović, A. Bonasera,* "Shedding Light on Graphene Quantum Dots: Key Synthetic Strategies, Characterization Tools, and Cutting-Edge Applications". *Materials* 2021, 14 (20), 6153. I.F. 3.623.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione come corresponding author e la sua posizione nella lista dei coautori

4. Y. Aleeva, V. Ferrara, A. Bonasera, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Superhydrophobic TiO₂/fluorinated polysiloxane hybrid coatings with controlled morphology for solar photocatalysis". *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* 2021, 631, 127633. I.F. 4.539.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

5. A. G. Gereanu, C. Sartorio, A. Bonasera, G. Giuliano, S. Cataldo, M. Scopelliti, G. Arrabito, B. Pignataro, "Pseudo-Planar Organic Heterojunctions by Sequential Printing of Quasi-Miscible Inks". *Coatings* 2021, 11 (5), 586. I.F. 2.881.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

6. G. Giuliano, A. Bonasera, M. Scopelliti, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Boosting the Performance of One-Step Solution-Processed Perovskite Solar Cells Using a Natural Monoterpene Alcohol as a Green Solvent Additive". *ACS Appl. Electron. Mater.* 2021, 3 (4), 1813-1825. I.F. 3.314.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

7. A. Bonasera,* G. Giuliano, G. Arrabito, B. Pignataro, "Tackling Performance Challenges in Organic Photovoltaics: An Overview about Compatibilizers". *Molecules* 2020, 25 (9), 2200. I.F. 4.41.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione come corresponding author e la sua posizione nella lista dei coautori

8. G. Ligorio, G. Cotella, A. Bonasera, N. Zorn Morales, G. Carnicella, B. Kobin, Q. Wang, N. Koch, S. Hecht, E. J. W. List-Kratochvil, F. Cacialli, "Modulating the luminance of organic light-emitting diodes via optical stimulation of a photochromic molecular monolayer at transparent oxide electrode". *Nanoscale* 2020, 12, 5444-5451. I.F. 7.790.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

9. G. Arrabito, A. Bonasera, G. Prestopino, A. Orsini, A. Mattocchia, E. Martinelli, B. Pignataro, P. G. Medaglia, "Layered Double Hydroxides: A Toolbox for Chemistry and Biology". *Crystals* 2019, 9 (7), 361. I.F. 2.404.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

10. S. Fredrich, A. Bonasera, V. Valderrey, S. Hecht, "Sensitive Assays by Nucleophile-Induced Rearrangement of Photoactivated Diarylethenes". *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140 (20), 6432-6440. I.F. 14.695.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

11. F. Zhao, A. Bonasera, U. Nöchel, M. Behl, D. Bléger, "Reversible Modulation of Elasticity in Fluoroazobenzene-Containing Hydrogels Using Green and Blue Light". *Macromol. Rapid Commun.* 2017, 1700527. I.F. 4.441.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

12. C.-Y. Huang, A. Bonasera, L. Hristov, Y. Garmshausen, B. M. Schmidt, D. Jacquemin, S. Hecht, "N,N'-Disubstituted Indigos as Readily Available Red-Light Photoswitches with Tunable Thermal Half-Lives". *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 15205-15211. I.F. 14.357.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

13. V. Valderrey, A. Bonasera, S. Fredrich, S. Hecht, "Light-Activated Sensitive Probes for Amine Detection". *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 1914-1918. I.F. 12.102.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

14. M. Herder, F. Eisenreich, A. Bonasera, A. Grafl, L. Grubert, M. Pätzelt, J. Schwarz, S. Hecht, "Light-Controlled Reversible Modulation of Frontier Molecular Orbital Energy Levels in Trifluoromethylated Diarylethenes". *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 3743-3754. I.F. 5.175.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

15. E. Tenori, A. Colusso, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, S. Osella, A. Ostric, R. Lazzaroni, M. Meneghetti, M. Prato, "Perylene Derivatives As Useful SERRS Reporters, Including Multiplexing Analysis". ACS Appl. Mater. Interfaces 2015, 7 (51), 28042-28048. I.F. 7.145.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

16. F. Ronconi, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Prato, R. Argazzi, S. Caramori, V. Cristino, C. A. Bignozzi, "Modification of Nanocrystalline WO₃ with a Dicationic Perylene Bisimide: Applications to Molecular Level Solar Water Splitting". J. Am. Chem. Soc. 2015, 137 (14), 4630-4633. I.F. 13.038.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

17. F. Rigodanza, E. Tenori, A. Bonasera, Z. Syrgiannis, M. Prato, "Fast and Efficient Microwave-Assisted Synthesis of Perylenebisimides". Eur. J. Org. Chem. 2015, 2015 (3), 5060-5063. I.F. 3.068.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

18. S. Jovanović, Z. Syrgiannis, Z. Marković, A. Bonasera, D. Kepić, M. Budimir, D. Milivojević, V. Spasojević, M. Dramicanin, V. Pavlović, B. Todorović-Marković, "Modification of Structural and Luminescence Properties of Graphene Quantum Dots by Gamma Irradiation and Their Application in a Photodynamic Therapy". ACS Appl. Mater. Interfaces 2015, 7 (46), 25865-25874. I.F. 7.105.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

19. Z. Syrgiannis, A. Bonasera, E. Tenori, V. La Parola, C. Hadad, M. Gruttadauria, F. Giacalone, M. Prato "Chemical modification of carbon nanomaterials (SWCNTs, DWCNTs, MWCNTs and SWCNHs) with diphenyl dichalcogenides": Nanoscale, 2015, 7, 6007. I.F. 7.706.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

20. G. Modugno, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Carraro, G. Giancane, L. Valli, M. Bonchio, M. Prato "Supramolecular Design of Low-dimensional Carbon Nano-hybrids encoding a Polyoxometalate-bis-Pyrene Tweezer" Chem. Commun., 2014,50, 4881-4883. I.F. 6.834.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale molto buona e in alcuni casi eccellente (impact factor medio 7.157). L'attività di ricerca evidenzia una notevole esperienza e maturità scientifica nell'ambito della preparazione e caratterizzazione di

sistemi applicativi innovativi quali celle solari, nanoparticelle e molecole fotosensibili ed è caratterizzata da elevata originalità, innovatività e rigore metodologico. Il contributo del candidato nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 2 delle 20 pubblicazioni selezionate come pure dalla sua indicazione come corresponding author in 3 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è generalmente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra una produttività scientifica alta (27 pubblicazioni nell'intervallo temporale 2014 – 2021) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 6.55, un numero di citazioni medie per prodotto di 17.56, e un H index pari a 12. I lavori sono congruenti con il bando, omogeneamente distribuiti negli anni di attività. L'apporto fornito dal candidato è testimoniato da un discreto numero di articoli in cui è presente come primo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

GIUDIZIO COLLEGALE

TITOLI

Il candidato Aurelio BONASERA ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze e Tecnologie Chimiche e Farmaceutiche nel 2015. Successivamente ha ricoperto il ruolo di Early-Stage Researcher all'interno del network di ricerca ITN Marie Skłodowska-Curie Actions, nel triennio 2015 – 2018, prima di essere assunto nel 2019, presso l'Università degli Studi di Palermo, in qualità di ricercatore a tempo determinato di tipo A. Nel periodo 2013-2016 ha collaborato ad attività didattiche legate al "Piano per le Lauree Scientifiche" e a supporto degli insegnamenti universitari di Chimica. A partire dal 2020 è docente di un modulo di laboratorio di un corso di Chimica Fisica. A partire dallo stesso anno ha collaborato allo svolgimento di attività didattiche di laboratorio a supporto di altri insegnamenti di Chimica Fisica ed ha anche svolto attività di docenza all'interno di un Master. Il candidato ha partecipato a numerosi congressi e workshop con contributi orali e poster. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di livello molto buono e una continuità temporale delle attività di ricerca e didattiche.

Il giudizio complessivo sui titoli è: MOLTO BUONO

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. G. Cotella, A. Bonasera,* G. Carnicella, A. Minotto, S. Hecht, F. Cacialli, "Diarylethenes in Optically Switchable Organic Light-Emitting Diodes: Direct Investigation of the Reversible Charge Carrier Trapping Process". *Adv. Opt. Mater.* 2021, 10 (2), 2101116. I.F. 9.926.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è ottima, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione come corresponding author.

2. G. Giuliano, A. Bonasera, G. Arrabito, B. Pignataro, "Semitransparent Perovskite Solar Cells for Building Integration and Tandem Photovoltaics: Design Strategies and Challenges". *Solar RRL* 2021, 5 (12), 2100702. I.F. 8.582.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

3. S. Dorontić, S. Jovanović, A. Bonasera,* "Shedding Light on Graphene Quantum Dots: Key Synthetic Strategies, Characterization Tools, and Cutting-Edge Applications". *Materials* 2021, 14 (20), 6153. I.F. 3.623.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal

Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione come corresponding author e la sua posizione nella lista dei coautori

4. Y. Aleeva, V. Ferrara, A. Bonasera, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Superhydrophobic TiO₂/fluorinated polysiloxane hybrid coatings with controlled morphology for solar photocatalysis". *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* 2021, 631, 127633. I.F. 4.539.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

5. A. G. Gereanu, C. Sartorio, A. Bonasera, G. Giuliano, S. Cataldo, M. Scopelliti, G. Arrabito, B. Pignataro, "Pseudo-Planar Organic Heterojunctions by Sequential Printing of Quasi-Miscible Inks". *Coatings* 2021, 11 (5), 586. I.F. 2.881.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

6. G. Giuliano, A. Bonasera, M. Scopelliti, D. Chillura Martino, B. Pignataro, "Boosting the Performance of One-Step Solution-Processed Perovskite Solar Cells Using a Natural Monoterpene Alcohol as a Green Solvent Additive". *ACS Appl. Electron. Mater.* 2021, 3 (4), 1813-1825. I.F. 3.314.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

7. A. Bonasera,* G. Giuliano, G. Arrabito, B. Pignataro, "Tackling Performance Challenges in Organic Photovoltaics: An Overview about Compatibilizers". *Molecules* 2020, 25 (9), 2200. I.F. 4.41.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione come corresponding author e la sua posizione nella lista dei coautori

8. G. Ligorio, G. Cotella, A. Bonasera, N. Zorn Morales, G. Carnicella, B. Kobin, Q. Wang, N. Koch, S. Hecht, E. J. W. List-Kratochvil, F. Cacialli, "Modulating the luminance of organic light-emitting diodes via optical stimulation of a photochromic molecular monolayer at transparent oxide electrode". *Nanoscale* 2020, 12, 5444-5451. I.F. 7.790.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

9. G. Arrabito, A. Bonasera, G. Prestopino, A. Orsini, A. Mattoccia, E. Martinelli, B. Pignataro, P. G. Medaglia, "Layered Double Hydroxides: A Toolbox for Chemistry and Biology". *Crystals* 2019, 9 (7), 361. I.F. 2.404.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

10. S. Fredrich, A. Bonasera, V. Valderrey, S. Hecht, "Sensitive Assays by Nucleophile-Induced Rearrangement of Photoactivated Diarylethenes". *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140 (20), 6432-6440. I.F. 14.695.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

11. F. Zhao, A. Bonasera, U. Nöchel, M. Behl, D. Bléger, "Reversible Modulation of Elasticity in Fluoroazobenzene-Containing Hydrogels Using Green and Blue Light". *Macromol. Rapid Commun.* 2017, 1700527. I.F. 4.441.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

12. C.-Y. Huang, A. Bonasera, L. Hristov, Y. Garmshausen, B. M. Schmidt, D. Jacquemin, S. Hecht, "N,N'-Disubstituted Indigos as Readily Available Red-Light Photoswitches with Tunable Thermal Half-Lives". *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 15205-15211. I.F. 14.357.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

13. V. Valderrey, A. Bonasera, S. Fredrich, S. Hecht, "Light-Activated Sensitive Probes for Amine Detection". *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 1914-1918. I.F. 12.102.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

14. M. Herder, F. Eisenreich, A. Bonasera, A. Grafl, L. Grubert, M. Pätzelt, J. Schwarz, S. Hecht, "Light-Controlled Reversible Modulation of Frontier Molecular Orbital Energy Levels in Trifluoromethylated Diarylethenes". *Chem. Eur. J.* 2017, 23, 3743-3754. I.F. 5.175.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

15. E. Tenori, A. Colusso, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, S. Osella, A. Ostric, R. Lazzaroni, M. Meneghetti, M. Prato, "Perylene Derivatives As Useful SERRS Reporters, Including Multiplexing Analysis". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (51), 28042-28048. I.F. 7.145.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

16. F. Ronconi, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Prato, R. Argazzi, S. Caramori, V. Cristino, C. A. Bignozzi, "Modification of Nanocrystalline WO₃ with a Dicationic Perylene Bisimide: Applications to Molecular Level Solar Water Splitting". *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137 (14), 4630-4633. I.F. 13.038.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

17. F. Rigodanza, E. Tenori, A. Bonasera, Z. Syrgiannis, M. Prato, "Fast and Efficient Microwave-Assisted Synthesis of Perylenebisimides". *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 2015 (3), 5060-5063. I.F. 3.068.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

18. S. Jovanović, Z. Syrgiannis, Z. Marković, A. Bonasera, D. Kepić, M. Budimir, D. Milivojević, V. Spasojević, M. Dramicanin, V. Pavlović, B. Todorović-Marković, "Modification of Structural and Luminescence Properties of Graphene Quantum Dots by Gamma Irradiation and Their Application in a Photodynamic Therapy". *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2015, 7 (46), 25865-25874. I.F. 7.105.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

19. Z. Syrgiannis, A. Bonasera, E. Tenori, V. La Parola, C. Hadad, M. Gruttadauria, F. Giacalone, M. Prato "Chemical modification of carbon nanomaterials (SWCNTs, DWCNTs, MWCNTs and SWCNHs) with diphenyl dichalcogenides" : *Nanoscale*, 2015, 7, 6007. I.F. 7.706.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

20. G. Modugno, Z. Syrgiannis, A. Bonasera, M. Carraro, G. Giancane, L. Valli, M. Bonchio, M. Prato "Supramolecular Design of Low-dimensional Carbon Nano-hybrids encoding a Polyoxometalate-bis-Pyrene Tweezer" *Chem. Commun.*, 2014,50, 4881-4883. I.F. 6.834.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste internazionali di livello molto buono e in alcuni casi eccellente (impact factor medio 7.157). L'attività di ricerca evidenzia una notevole esperienza e maturità scientifica nell'ambito della preparazione e caratterizzazione di sistemi innovativi di grande potenziale applicativo, quali celle solari, nanoparticelle e molecole fotosensibili. I lavori sono caratterizzati da elevata originalità, innovatività e rigore metodologico. Il contributo del candidato nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 2 delle 20 pubblicazioni selezionate come pure dalla sua indicazione come corresponding author in 3 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica complessiva del candidato è generalmente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra una produttività scientifica alta (27 pubblicazioni nell'intervallo temporale 2014 – 2021) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 6.55, da un numero di citazioni medie per prodotto di 17.56, e da un H index pari a 12. I lavori sono congruenti con il bando e omogeneamente distribuiti negli anni di attività. L'apporto fornito dal candidato è testimoniato da un discreto numero di articoli in cui è presente come primo nome e/o autore corrispondente.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

CANDIDATO: MANCINI Giordano

COMMISSARIO 1

TITOLI

Il candidato Giordano MANCINI ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza e quello di Dottore in Genetica presso l'Università della Tuscia nel 2012. Ha avuto diversi assegni di ricerca presso centri di calcolo e presso la Scuola Normale di Pisa, dove è stato anche ricercatore a tempo determinato di tipo A. Alla Normale di Pisa è attualmente Capo Settore del centro di calcolo ad alta prestazione. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curricolare di livello molto buono, per quanto riguarda l'attività di ricerca nell'ambito della chimica computazionale e una riconosciuta maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: MOLTO BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Mancini, G.*; Fusè, M.; Lazzari, F.; Chandramouli, B.; Barone, V. Unsupervised Search of Low-Lying Conformers with Spectroscopic Accuracy: A Two-Step Algorithm Rooted into the Island Model Evolutionary Algorithm. *J. Chem. Phys.* 2020, 153 (12), 124110. Citazioni: 5 IF: 3.166.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

2. Mancini, G.*; Del Galdo, S.; Chandramouli, B.; Pagliai, M.; Barone, V. Computational Spectroscopy in Solution by Integration of Variational and Perturbative Approaches on Top of Clusterized Molecular Dynamics. *J. Chem. Theory Comput.* 2020, 16 (9), 5747–5761. Citazioni: 2. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente.

3. Lazzari, F.; Salvadori, A.; Mancini, G.*; Barone, V. Molecular Perception for Visualization and Computation: The Proxima Library. *J. Chem. Inf. Model.* 2020, acs.jcim.0c00076. Citazioni: 5 IF: 5.39.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

4. Busato, M.; Melchior, A.; Migliorati, V.; Colella, A.; Persson, I.; Mancini, G.; Veclani, D.; D'Angelo, P. Elusive Coordination of the Ag + Ion in Aqueous Solution: Evidence for a Linear Structure. *Inorg. Chem.* 2020, acs.inorgchem.0c02494. Citazioni: 5 IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

5. Chandramouli, B.; Del Galdo, S.; Fusè, M.; Barone, V.; Mancini, G.* Two-Level Stochastic Search of Low-Energy Conformers for Molecular Spectroscopy: Implementation and Validation of MM and QM Models. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 10.1039.C9CP03557E. Citazioni: 12, IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

6. Salvadori, A.; Fusè, M.; Mancini, G.*; Rampino, S.*; Barone, V. Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality: Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality. *Journal of Computational Chemistry* 2018. <https://doi.org/10.1002/jcc.25523>. Citazioni: 26. IF: 3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

7. Sessa, F.; Migliorati, V.; Serva, A.; Lapi, A.; Aquilanti, G.; Mancini, G.; D'Angelo, P. On the Coordination of Zn²⁺ Ion in Tf₂N⁻ Based Ionic Liquids: Structural and Dynamic Properties Depending on the Nature of the Organic Cation. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2018. <https://doi.org/10.1039/C7CP07497B>. Citazioni: 19. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona,

8. Fracchia, F.; Del Frate, G.; Mancini, G.; Rocchia, W.; Barone, V. Force Field Parametrization of Metal Ions From Statistical Learning Techniques. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00779>. Citazioni: 32. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

9. Salvadori, A.; Del Frate, G.; Pagliai, M.; Mancini, G.*; Barone, V. Immersive Virtual Reality in Computational Chemistry: Applications to the Analysis of QM and MM Data. *Int. J. Quantum Chem.* 2016, 116 (22), 1731–1746. <https://doi.org/10.1002/qua.25207>. Citazioni: 44 IF: 2.688. Cover article.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La copertina assegnata al lavoro testimonia la qualità dello stesso. . Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

10. Presti, D.; Pedone, A.; Mancini, G.*; Duce, C.; Tiné, M. R.; Barone, V. Insights into Structural and Dynamical Features of Water at Halloysite Interfaces Probed by DFT and Classical Molecular Dynamics Simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18 (3), 2164–2174. <https://doi.org/10.1039/C5CP05920H>. Citazioni: 19 IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

11. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Sessa, F.; Mancini, G.; Persson, I. XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution. *The Journal of Physical Chemistry B* 2016, 120 (17), 4114–4124. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b01054>. Citazioni: 41. IF: 3.051.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

12. Pagliai, M.; Mancini, G.; Carnimeo, I.; De Mitri, N.; Barone, V. Electronic Absorption Spectra of Pyridine and Nicotine in Aqueous Solution with a Combined Molecular Dynamics and Polarizable QM/MM Approach. *J. Comput. Chem.* 2017, 38 (6), 319–335. <https://doi.org/10.1002/jcc.24683>. Citazioni: 25. IF:3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

13. Macchiagodena, M.; Mancini, G.*; Pagliai, M.*; Barone, V. Accurate Prediction of Bulk Properties in Hydrogen Bonded Liquids: Amides as Case Studies. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. <https://doi.org/10.1039/C6CP04666E>. Citazioni: 27. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. . Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

14. Egidi, F.; Russo, R.; Carnimeo, I.; D'Urso, A.; Mancini, G.; Cappelli, C. The Electronic Circular Dichroism of Nicotine in Aqueous Solution: A Test Case for Continuum and Explicit-Continuum Solvation Approaches. *The Journal of Physical Chemistry A* 2015, 150108134059007. <https://doi.org/10.1021/jp510542x>. Citazioni: 26 IF: 2.725.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta.

15. Mancini, G.*; Zazza, C. F429 Regulation of Tunnels in Cytochrome P450 2B4: A Top Down Study of Multiple Molecular Dynamics Simulations. *PLOS ONE* 2015, 10 (9), e0137075. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0137075>. Citazioni: 10 IF: 3.788.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. . Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

16. Mancini, G.*; Brancato, G.; Chandramouli, B.; Barone, V. Organic Solvent Simulations under Non-Periodic Boundary Conditions: A Library of Effective Potentials for the GLOB Model. Chemical Physics Letters 2015. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.03.001>. Citazioni: 11 IF: 1.999.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta. . Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

17. Giachin, G.; Mai, P. T.; Tran, T. H.; Salzano, G.; Benetti, F.; Migliorati, V.; Arcovito, A.; Longa, S. D.; Mancini, G.; D'Angelo, P.; Legname, G. The Non-Octarepeat Copper Binding Site of the Prion Protein Is a Key Regulator of Prion Conversion. Scientific Reports 2015, 5, 15253. <https://doi.org/10.1038/srep15253>. Citazioni:27 IF: 5.134.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

18. Mancini, G.*; Brancato, G.*; Barone, V. Combining the Fluctuating Charge Method, Non-Periodic Boundary Conditions and Meta-Dynamics: Aqua Ions as Case Studies. Journal of Chemical Theory and Computation 2014, 140221073102006. <https://doi.org/10.1021/ct400988e>. Citazioni: 22. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona. . Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

19. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Persson, I.; Mancini, G.; Longa, S. D. Quantitative Analysis of Deconvolved X-Ray Absorption Near-Edge Structure Spectra: A Tool To Push the Limits of the X-Ray Absorption Spectroscopy Technique. Inorganic Chemistry 2014, 140829151720009. <https://doi.org/10.1021/ic501366d>. Citazioni: 7 IF: 4.185.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

20. Migliorati, V.; Mancini, G.; Tatoli, S.; Zitolo, A.; Filipponi, A.; De Panfilis, S.; Di Cicco, A.; D'Angelo, P. Hydration Properties of the Zn²⁺ Ion in Water at High Pressure. Inorganic Chemistry 2013, 52 (2), 1141–1150. <https://doi.org/10.1021/ic302530k>. Citazioni: 36. IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona o molto buona (impact factor medio 4.203). L'attività di ricerca evidenzia un'eccellente esperienza nell'ambito dell'applicazione e dello sviluppo della dinamica molecolare, nello studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi. Il contributo del candidato nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 6 delle 20 pubblicazioni selezionate e dal suo posizionamento come corresponding o co-corresponding author in 11 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: OTTIMA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è pienamente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra una produttività scientifica alta (76 pubblicazioni in 16 anni), continua nel tempo e di

qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 3,56; un numero di citazioni medie per prodotto di 17,97 e un Hirsh index pari a 25. L'apporto fornito dal candidato è testimoniato da un numero elevato di articoli in cui è presente come primo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: OTTIMO.

COMMISSARIO 2

TITOLI

Il candidato Giordano MANCINI ha ottenuto il titolo di Dottore di Ricerca prima in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza (2008) e poi in Genetica presso l'Università della Tuscia (2012). Successivamente, è stato titolare di vari assegni di ricerca presso la Scuola Normale di Pisa, ove ha inoltre prestato servizio nel ruolo di ricercatore a tempo determinato di tipologia A (periodo 2013-2018). Dal 2017, il candidato è Capo Settore di un centro di calcolo. Alla luce dell'analisi dei titoli presentati, il profilo curricolare del candidato risulta molto buono per ciò che concerne la continuità temporale dell'attività di ricerca svolta in particolare nel campo della chimica computazionale, dimostrando il raggiungimento di un'adeguata maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: MOLTO BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Mancini, G.*; Fusè, M.; Lazzari, F.; Chandramouli, B.; Barone, V. Unsupervised Search of Low-Lying Conformers with Spectroscopic Accuracy: A Two-Step Algorithm Rooted into the Island Model Evolutionary Algorithm. *J. Chem. Phys.* 2020, 153 (12), 124110. Citazioni: 5 IF: 3.166.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

2. Mancini, G.*; Del Galdo, S.; Chandramouli, B.; Pagliai, M.; Barone, V. Computational Spectroscopy in Solution by Integration of Variational and Perturbative Approaches on Top of Clusterized Molecular Dynamics. *J. Chem. Theory Comput.* 2020, 16 (9), 5747–5761. Citazioni: 2. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

3. Lazzari, F.; Salvadori, A.; Mancini, G.*; Barone, V. Molecular Perception for Visualization and Computation: The Proxima Library. *J. Chem. Inf. Model.* 2020, acs.jcim.0c00076. Citazioni: 5 IF: 5.39.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente.

4. Busato, M.; Melchior, A.; Migliorati, V.; Colella, A.; Persson, I.; Mancini, G.; Veclani, D.; D'Angelo, P. Elusive Coordination of the Ag + Ion in Aqueous Solution: Evidence for a Linear Structure. *Inorg. Chem.* 2020, acs.inorgchem.0c02494. Citazioni: 5 IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

5. Chandramouli, B.; Del Galdo, S.; Fusè, M.; Barone, V.; Mancini, G.* Two-Level Stochastic Search of Low-Energy Conformers for Molecular Spectroscopy: Implementation and Validation of MM and QM Models. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 10.1039.C9CP03557E. Citazioni: 12, IF: 3.802.

VALUTAZIONE:

La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

6. Salvadori, A.; Fusè, M.; Mancini, G.*; Rampino, S.*; Barone, V. Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality: Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality. *Journal of Computational Chemistry* 2018. <https://doi.org/10.1002/jcc.25523>. Citazioni: 26. IF: 3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente.

7. Sessa, F.; Migliorati, V.; Serva, A.; Lapi, A.; Aquilanti, G.; Mancini, G.; D'Angelo, P. On the Coordination of Zn 2+ Ion in Tf 2 N – Based Ionic Liquids: Structural and Dynamic Properties Depending on the Nature of the Organic Cation. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2018. <https://doi.org/10.1039/C7CP07497B>. Citazioni: 19. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

8. Fracchia, F.; Del Frate, G.; Mancini, G.; Rocchia, W.; Barone, V. Force Field Parametrization of Metal Ions From Statistical Learning Techniques. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00779>. Citazioni: 32. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona.

9. Salvadori, A.; Del Frate, G.; Pagliai, M.; Mancini, G.*; Barone, V. Immersive Virtual Reality in Computational Chemistry: Applications to the Analysis of QM and MM Data. *Int. J. Quantum Chem.* 2016, 116 (22), 1731–1746. <https://doi.org/10.1002/qua.25207>. Citazioni: 44 IF: 2.688. Cover article.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente.

10. Presti, D.; Pedone, A.; Mancini, G.*; Duce, C.; Tiné, M. R.; Barone, V. Insights into Structural and Dynamical Features of Water at Halloysite Interfaces Probed by DFT and Classical Molecular Dynamics Simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18 (3), 2164–2174. <https://doi.org/10.1039/C5CP05920H>. Citazioni: 19 IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente.

11. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Sessa, F.; Mancini, G.; Persson, I. XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution. *The Journal of Physical Chemistry B* 2016, 120 (17), 4114–4124. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b01054>. Citazioni: 41. IF: 3.051.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

12. Pagliai, M.; Mancini, G.; Carnimeo, I.; De Mitri, N.; Barone, V. Electronic Absorption Spectra of Pyridine and Nicotine in Aqueous Solution with a Combined Molecular Dynamics and Polarizable QM/MM Approach. *J. Comput. Chem.* 2017, 38 (6), 319–335. <https://doi.org/10.1002/jcc.24683>. Citazioni: 25. IF:3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

13. Macchiagodena, M.; Mancini, G.*; Pagliai, M.*; Barone, V. Accurate Prediction of Bulk Properties in Hydrogen Bonded Liquids: Amides as Case Studies. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. <https://doi.org/10.1039/C6CP04666E>. Citazioni: 27. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente.

14. Egidi, F.; Russo, R.; Camimeo, I.; D'Urso, A.; Mancini, G.; Cappelli, C. The Electronic Circular Dichroism of Nicotine in Aqueous Solution: A Test Case for Continuum and Explicit-Continuum Solvation Approaches. *The Journal of Physical Chemistry A* 2015, 150108134059007. <https://doi.org/10.1021/jp510542x>. Citazioni: 26 IF: 2.725.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta.

15. Mancini, G.*; Zazza, C. F429 Regulation of Tunnels in Cytochrome P450 2B4: A Top Down Study of Multiple Molecular Dynamics Simulations. *PLOS ONE* 2015, 10 (9), e0137075. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0137075>. Citazioni: 10 IF: 3.788.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

16. Mancini, G.*; Brancato, G.; Chandramouli, B.; Barone, V. Organic Solvent Simulations under Non-Periodic Boundary Conditions: A Library of Effective Potentials for the GLOB Model. *Chemical Physics Letters* 2015. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.03.001>. Citazioni: 11 IF: 1.999.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

17. Giachin, G.; Mai, P. T.; Tran, T. H.; Salzano, G.; Benetti, F.; Migliorati, V.; Arcovito, A.; Longa, S. D.; Mancini, G.; D'Angelo, P.; Legname, G. The Non-Octarepeat Copper Binding Site of the Prion Protein Is a Key Regulator of Prion Conversion. *Scientific Reports* 2015, 5, 15253. <https://doi.org/10.1038/srep15253>. Citazioni: 27 IF: 5.134.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

18. Mancini, G.*; Brancato, G.*; Barone, V. Combining the Fluctuating Charge Method, Non-Periodic Boundary Conditions and Meta-Dynamics: Aqua Ions as Case Studies. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2014, 140221073102006. <https://doi.org/10.1021/ct400988e>. Citazioni: 22. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona. Il contributo individuale del candidato risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

19. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Persson, I.; Mancini, G.; Longa, S. D. Quantitative Analysis of Deconvolved X-Ray Absorption Near-Edge Structure Spectra: A Tool To Push the Limits of the X-Ray Absorption Spectroscopy Technique. *Inorganic Chemistry* 2014, 140829151720009. <https://doi.org/10.1021/ic501366d>. Citazioni: 7 IF: 4.185.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

20. Migliorati, V.; Mancini, G.; Tatoli, S.; Zitolo, A.; Filipponi, A.; De Panfilis, S.; Di Cicco, A.; D'Angelo, P. Hydration Properties of the Zn²⁺ Ion in Water at High Pressure. *Inorganic Chemistry* 2013, 52 (2), 1141–1150. <https://doi.org/10.1021/ic302530k>. Citazioni: 36. IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione risultano coerenti con il SSD di riferimento e sono mediamente pubblicate su riviste caratterizzate da collocazione editoriale buona o molto buona. Le pubblicazioni evidenziano un elevato livello di originalità, innovatività e rigore metodologico e documentano l'elevata maturità scientifica raggiunta nell'ambito dell'analisi delle proprietà strutturali di sistemi complessi tramite approcci computazionali avanzati. Il contributo individuale del candidato risulta buono, come dimostrato dal ruolo di primo o ultimo autore in 6 delle 20 pubblicazioni e dal ruolo di autore o co-autore corrispondente in 11 delle 20 pubblicazioni.

La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: **OTTIMA**.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica complessiva del candidato è pienamente coerente con il SSD CHIM/02. La produttività scientifica è molto elevata (76 pubblicazioni nel periodo 2005 – 2022) e di qualità molto buona, sulla base dell'I.F. medio (3.56) e del n° di citazioni medie (17.97) per pubblicazione nonché dell'H index, pari a 25. Il contributo individuale del candidato si evince da un elevato numero di lavori pubblicati nel ruolo di primo autore o autore corrispondente.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: **OTTIMO**.

COMMISSARIO 3

TITOLI

Il candidato Giordano MANCINI ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza e quello di Dottore in Genetica presso l'Università della Tuscia nel 2012. Ha avuto diversi assegni di ricerca presso centri di calcolo e presso la Scuola Normale di Pisa. Nella stessa sede ha avuto un contratto di ricercatore a tempo determinato di tipologia A dal 13/03/2013 al 29/12/2018 e, dal 2017, è Capo Settore del centro di calcolo ad alta prestazione. Il candidato è attualmente in possesso della abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore di seconda fascia di cui all'articolo 16 della legge 30 dicembre 2010, n. 240 per il Settore concorsuale 03/A2 conseguita in data 10/04/2017, nella tornata 1532/2016. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di livello molto buono, per quanto riguarda l'attività di ricerca nell'ambito della chimica computazionale e una raggiunta maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: **MOLTO BUONO**.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. Mancini, G.*; Fusè, M.; Lazzari, F.; Chandramouli, B.; Barone, V. Unsupervised Search of Low-Lying Conformers with Spectroscopic Accuracy: A Two-Step Algorithm Rooted into the Island Model Evolutionary Algorithm. *J. Chem. Phys.* 2020, 153 (12), 124110. Citazioni: 5 IF: 3.166.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

2. Mancini, G.*; Del Galdo, S.; Chandramouli, B.; Pagliai, M.; Barone, V. Computational Spectroscopy in Solution by Integration of Variational and Perturbative Approaches on Top of

Clusterized Molecular Dynamics. *J. Chem. Theory Comput.* 2020, 16 (9), 5747–5761. Citazioni: 2. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

3. Lazzari, F.; Salvadori, A.; Mancini, G.*; Barone, V. Molecular Perception for Visualization and Computation: The Proxima Library. *J. Chem. Inf. Model.* 2020, acs.jcim.0c00076. Citazioni: 5 IF: 5.39.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

4. Busato, M.; Melchior, A.; Migliorati, V.; Colella, A.; Persson, I.; Mancini, G.; Veclani, D.; D'Angelo, P. Elusive Coordination of the Ag⁺ Ion in Aqueous Solution: Evidence for a Linear Structure. *Inorg. Chem.* 2020, acs.inorgchem.0c02494. Citazioni: 5 IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

5. Chandramouli, B.; Del Galdo, S.; Fusè, M.; Barone, V.; Mancini, G.* Two-Level Stochastic Search of Low-Energy Conformers for Molecular Spectroscopy: Implementation and Validation of MM and QM Models. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 10.1039/C9CP03557E. Citazioni: 12, IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

6. Salvadori, A.; Fusè, M.; Mancini, G.*; Rampino, S.*; Barone, V. Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality: Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality. *Journal of Computational Chemistry* 2018. <https://doi.org/10.1002/jcc.25523>. Citazioni: 26. IF: 3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author.

7. Sessa, F.; Migliorati, V.; Serva, A.; Lapi, A.; Aquilanti, G.; Mancini, G.; D'Angelo, P. On the Coordination of Zn²⁺ Ion in Tf₂N⁻ Based Ionic Liquids: Structural and Dynamic Properties Depending on the Nature of the Organic Cation. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2018. <https://doi.org/10.1039/C7CP07497B>. Citazioni: 19. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

8. Fracchia, F.; Del Frate, G.; Mancini, G.; Rocchia, W.; Barone, V. Force Field Parametrization of Metal Ions From Statistical Learning Techniques. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00779>. Citazioni: 32. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

9. Salvadori, A.; Del Frate, G.; Pagliai, M.; Mancini, G.*; Barone, V. Immersive Virtual Reality in Computational Chemistry: Applications to the Analysis of QM and MM Data. *Int. J. Quantum Chem.* 2016, 116 (22), 1731–1746. <https://doi.org/10.1002/qua.25207>. Citazioni: 44 IF: 2.688. Cover article.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La copertina assegnata al lavoro testimonia la qualità dello stesso. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

10. Presti, D.; Pedone, A.; Mancini, G.*; Duce, C.; Tiné, M. R.; Barone, V. Insights into Structural and Dynamical Features of Water at Halloysite Interfaces Probed by DFT and Classical Molecular Dynamics Simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18 (3), 2164–2174. <https://doi.org/10.1039/C5CP05920H>. Citazioni: 19 IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

11. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Sessa, F.; Mancini, G.; Persson, I. XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution. *The Journal of Physical Chemistry B* 2016, 120 (17), 4114–4124. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b01054>. Citazioni: 41. IF: 3.051.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

12. Pagliai, M.; Mancini, G.; Carnimeo, I.; De Mitri, N.; Barone, V. Electronic Absorption Spectra of Pyridine and Nicotine in Aqueous Solution with a Combined Molecular Dynamics and Polarizable QM/MM Approach. *J. Comput. Chem.* 2017, 38 (6), 319–335. <https://doi.org/10.1002/jcc.24683>. Citazioni: 25. IF:3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

13. Macchiagodena, M.; Mancini, G.*; Pagliai, M.*; Barone, V. Accurate Prediction of Bulk Properties in Hydrogen Bonded Liquids: Amides as Case Studies. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. <https://doi.org/10.1039/C6CP04666E>. Citazioni: 27. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author.

14. Egidi, F.; Russo, R.; Carnimeo, I.; D'Urso, A.; Mancini, G.; Cappelli, C. The Electronic Circular Dichroism of Nicotine in Aqueous Solution: A Test Case for Continuum and Explicit-Continuum Solvation Approaches. *The Journal of Physical Chemistry A* 2015, 150108134059007. <https://doi.org/10.1021/jp510542x>. Citazioni: 26 IF: 2.725.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

15. Mancini, G.*; Zazza, C. F429 Regulation of Tunnels in Cytochrome P450 2B4: A Top Down Study of Multiple Molecular Dynamics Simulations. PLOS ONE 2015, 10 (9), e0137075. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0137075>. Citazioni: 10 IF: 3.788.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

16. Mancini, G.*; Brancato, G.; Chandramouli, B.; Barone, V. Organic Solvent Simulations under Non-Periodic Boundary Conditions: A Library of Effective Potentials for the GLOB Model. Chemical Physics Letters 2015. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.03.001>. Citazioni: 11 IF: 1.999.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

17. Giachin, G.; Mai, P. T.; Tran, T. H.; Salzano, G.; Benetti, F.; Migliorati, V.; Arcovito, A.; Longa, S. D.; Mancini, G.; D'Angelo, P.; Legname, G. The Non-Octarepeat Copper Binding Site of the Prion Protein Is a Key Regulator of Prion Conversion. Scientific Reports 2015, 5, 15253. <https://doi.org/10.1038/srep15253>. Citazioni: 27 IF: 5.134.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

18. Mancini, G.*; Brancato, G.*; Barone, V. Combining the Fluctuating Charge Method, Non-Periodic Boundary Conditions and Meta-Dynamics: Aqua Ions as Case Studies. Journal of Chemical Theory and Computation 2014, 140221073102006. <https://doi.org/10.1021/ct400988e>. Citazioni: 22. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

19. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Persson, I.; Mancini, G.; Longa, S. D. Quantitative Analysis of Deconvolved X-Ray Absorption Near-Edge Structure Spectra: A Tool To Push the Limits of the X-Ray Absorption Spectroscopy Technique. Inorganic Chemistry 2014, 140829151720009. <https://doi.org/10.1021/ic501366d>. Citazioni: 7 IF: 4.185.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

20. Migliorati, V.; Mancini, G.; Tatoli, S.; Zitolo, A.; Filipponi, A.; De Panfilis, S.; Di Cicco, A.; D'Angelo, P. Hydration Properties of the Zn²⁺ Ion in Water at High Pressure. Inorganic Chemistry 2013, 52 (2), 1141–1150. <https://doi.org/10.1021/ic302530k>. Citazioni: 36. IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona o molto buona (impact factor medio 4.203). L'attività di ricerca evidenzia una eccellente esperienza nell'ambito dell'applicazione e dello sviluppo della dinamica molecolare, nello studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi complessi ed è caratterizzata da elevata originalità, innovatività e rigore metodologico. Il contributo del candidato nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 6 delle 20 pubblicazioni selezionate come pure dalla sua indicazione come corresponding o co-corresponding author in 11 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: OTTIMA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è pienamente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra una produttività scientifica alta (76 pubblicazioni nell'intervallo temporale 2005 – 2022) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 3,56; un numero di citazioni medie per prodotto di 17,97 e un Hirsh index pari a 25. I lavori sono congruenti con il bando, omogeneamente distribuiti negli anni di attività. L'apporto fornito dal candidato è testimoniato da un notevole numero di articoli in cui è presente come primo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: OTTIMO.

GIUDIZIO COLLEGIALE

TITOLI

Il candidato Giordano MANCINI ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2008 presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza e quello di Dottore in Genetica presso l'Università della Tuscia nel 2012. Ha avuto diversi assegni di ricerca presso centri di calcolo e presso la Scuola Normale di Pisa. Nella stessa sede ha ricoperto il ruolo di ricercatore a tempo determinato di tipologia A dal 2013 al 2018 e, dal 2017, è Capo Settore del centro di calcolo ad alta prestazione. L'analisi dei titoli prodotti dal candidato mette in luce un profilo curriculare di livello molto buono, per quanto riguarda l'attività di ricerca nell'ambito della chimica computazionale e una raggiunta maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: MOLTO BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE

1. Mancini, G.*; Fusè, M.; Lazzari, F.; Chandramouli, B.; Barone, V. Unsupervised Search of Low-Lying Conformers with Spectroscopic Accuracy: A Two-Step Algorithm Rooted into the Island Model Evolutionary Algorithm. *J. Chem. Phys.* 2020, 153 (12), 124110. Citazioni: 5 IF: 3.166.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

2. Mancini, G.*; Del Galdo, S.; Chandramouli, B.; Pagliai, M.; Barone, V. Computational Spectroscopy in Solution by Integration of Variational and Perturbative Approaches on Top of Clusterized Molecular Dynamics. *J. Chem. Theory Comput.* 2020, 16 (9), 5747–5761. Citazioni: 2. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come

dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

3. Lazzari, F.; Salvadori, A.; Mancini, G.*; Barone, V. Molecular Perception for Visualization and Computation: The Proxima Library. *J. Chem. Inf. Model.* 2020, *acs.jcim.0c00076*. Citazioni: 5 IF: 5.39.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

4. Busato, M.; Melchior, A.; Migliorati, V.; Colella, A.; Persson, I.; Mancini, G.; Veclani, D.; D'Angelo, P. Elusive Coordination of the Ag⁺ Ion in Aqueous Solution: Evidence for a Linear Structure. *Inorg. Chem.* 2020, *acs.inorgchem.0c02494*. Citazioni: 5 IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

5. Chandramouli, B.; Del Galdo, S.; Fusè, M.; Barone, V.; Mancini, G.* Two-Level Stochastic Search of Low-Energy Conformers for Molecular Spectroscopy: Implementation and Validation of MM and QM Models. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, *10.1039.C9CP03557E*. Citazioni: 12, IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

6. Salvadori, A.; Fusè, M.; Mancini, G.*; Rampino, S.*; Barone, V. Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality: Diving into Chemical Bonding: An Immersive Analysis of the Electron Charge Rearrangement through Virtual Reality. *Journal of Computational Chemistry* 2018. <https://doi.org/10.1002/jcc.25523>. Citazioni: 26. IF: 3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author.

7. Sessa, F.; Migliorati, V.; Serva, A.; Lapi, A.; Aquilanti, G.; Mancini, G.; D'Angelo, P. On the Coordination of Zn²⁺ Ion in Tf⁻ Based Ionic Liquids: Structural and Dynamic Properties Depending on the Nature of the Organic Cation. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2018. <https://doi.org/10.1039/C7CP07497B>. Citazioni: 19. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

8. Fracchia, F.; Del Frate, G.; Mancini, G.; Rocchia, W.; Barone, V. Force Field Parametrization of Metal Ions From Statistical Learning Techniques. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00779>. Citazioni: 32. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

9. Salvadori, A.; Del Frate, G.; Pagliai, M.; Mancini, G.*; Barone, V. Immersive Virtual Reality in Computational Chemistry: Applications to the Analysis of QM and MM Data. *Int. J. Quantum*

Chem. 2016, 116 (22), 1731–1746. <https://doi.org/10.1002/qua.25207>. Citazioni: 44 IF: 2.688. Cover article.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La copertina assegnata al lavoro testimonia la qualità dello stesso. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

10. Presti, D.; Pedone, A.; Mancini, G.*; Duce, C.; Tiné, M. R.; Barone, V. Insights into Structural and Dynamical Features of Water at Halloysite Interfaces Probed by DFT and Classical Molecular Dynamics Simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18 (3), 2164–2174. <https://doi.org/10.1039/C5CP05920H>. Citazioni: 19 IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

11. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Sessa, F.; Mancini, G.; Persson, I. XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution. *The Journal of Physical Chemistry B* 2016, 120 (17), 4114–4124. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b01054>. Citazioni: 41. IF: 3.051.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

12. Pagliai, M.; Mancini, G.; Carnimeo, I.; De Mitri, N.; Barone, V. Electronic Absorption Spectra of Pyridine and Nicotine in Aqueous Solution with a Combined Molecular Dynamics and Polarizable QM/MM Approach. *J. Comput. Chem.* 2017, 38 (6), 319–335. <https://doi.org/10.1002/jcc.24683>. Citazioni: 25. IF:3.568.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

13. Macchiagodena, M.; Mancini, G.*; Pagliai, M.*; Barone, V. Accurate Prediction of Bulk Properties in Hydrogen Bonded Liquids: Amides as Case Studies. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. <https://doi.org/10.1039/C6CP04666E>. Citazioni: 27. IF: 3.802.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author.

14. Egidì, F.; Russo, R.; Camimeo, I.; D'Urso, A.; Mancini, G.; Cappelli, C. The Electronic Circular Dichroism of Nicotine in Aqueous Solution: A Test Case for Continuum and Explicit-Continuum Solvation Approaches. *The Journal of Physical Chemistry A* 2015, 150108134059007. <https://doi.org/10.1021/jp510542x>. Citazioni: 26 IF: 2.725.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

15. Mancini, G.*; Zazza, C. F429 Regulation of Tunnels in Cytochrome P450 2B4: A Top Down Study of Multiple Molecular Dynamics Simulations. *PLOS ONE* 2015, 10 (9), e0137075. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0137075>. Citazioni: 10 IF: 3.788.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

16. Mancini, G.*; Brancato, G.; Chandramouli, B.; Barone, V. Organic Solvent Simulations under Non-Periodic Boundary Conditions: A Library of Effective Potentials for the GLOB Model. *Chemical Physics Letters* 2015. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.03.001>. Citazioni: 11 IF: 1.999.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

17. Giachin, G.; Mai, P. T.; Tran, T. H.; Salzano, G.; Benetti, F.; Migliorati, V.; Arcovito, A.; Longa, S. D.; Mancini, G.; D'Angelo, P.; Legname, G. The Non-Octarepeat Copper Binding Site of the Prion Protein Is a Key Regulator of Prion Conversion. *Scientific Reports* 2015, 5, 15253. <https://doi.org/10.1038/srep15253>. Citazioni:27 IF: 5.134.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

18. Mancini, G.*; Brancato, G.*; Barone, V. Combining the Fluctuating Charge Method, Non-Periodic Boundary Conditions and Meta-Dynamics: Aqua Ions as Case Studies. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2014, 140221073102006. <https://doi.org/10.1021/ct400988e>. Citazioni: 22. IF: 6.652.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. Il candidato ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori.

19. D'Angelo, P.; Migliorati, V.; Persson, I.; Mancini, G.; Longa, S. D. Quantitative Analysis of Deconvolved X-Ray Absorption Near-Edge Structure Spectra: A Tool To Push the Limits of the X-Ray Absorption Spectroscopy Technique. *Inorganic Chemistry* 2014, 140829151720009. <https://doi.org/10.1021/ic501366d>. Citazioni: 7 IF: 4.185.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

20. Migliorati, V.; Mancini, G.; Tatoli, S.; Zitolo, A.; Filipponi, A.; De Panfilis, S.; Di Cicco, A.; D'Angelo, P. Hydration Properties of the Zn²⁺ Ion in Water at High Pressure. *Inorganic Chemistry* 2013, 52 (2), 1141–1150. <https://doi.org/10.1021/ic302530k>. Citazioni: 36. IF: 4.815.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona o molto buona (impact factor medio 4.203). L'attività di ricerca evidenzia una eccellente esperienza nell'ambito dell'applicazione e dello sviluppo della dinamica molecolare, nello studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi complessi ed è caratterizzata da elevata originalità, innovatività e rigore metodologico. Il contributo del candidato nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua buona presenza come primo o ultimo autore (in 6 delle 20 pubblicazioni selezionate) come pure dalla sua frequente indicazione come corresponding o co-corresponding author (11 pubblicazioni). La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel

complesso: OTTIMA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è pienamente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra una produttività scientifica notevole (76 pubblicazioni nell'intervallo temporale 2005 – 2022) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 3,56; da un numero medio di citazioni per prodotto di 17,97 e da un Hirsh index pari a 25. I lavori sono congruenti con il bando e distribuiti con continuità negli anni di attività. L'apporto fornito dal candidato è testimoniato da un notevole numero di articoli in cui è presente come primo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: OTTIMO.

CANDIDATA: MIGLIORATI Valentina

COMMISSARIO 1

TITOLI

La candidata Valentina MIGLIORATI ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2009. E' stata titolare di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" quasi ininterrottamente fino al 2021, quando è diventata ricercatrice a tempo determinato di tipo A presso lo stesso Dipartimento. Inerentemente all'attività didattica, ha tenuto lezioni di esercitazioni per il corso di Chimica Fisica II per la Laurea triennale in Chimica, è stata titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica e di un insegnamento per il corso di dottorato in Scienze Chimiche, presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". La candidata vanta un numero elevato di partecipazioni a corsi di perfezionamento congressi e workshop, con presentazioni orali (in un caso come oratrice invitata) e poster. Ha partecipato, a volte come responsabile scientifico), a numerosi progetti, è stata referee di diverse riviste scientifiche internazionali ed ha svolto attività Editoriale per una di esse. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata evidenzia un curriculum di livello ottimo, per quanto riguarda l'attività di didattica e di ricerca nell'ambito della chimica computazionale, evidenziando e una raggiunta maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: OTTIMO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. V. Migliorati*, G. Fazio, S. Pollastri, A. Gentili, P. Tomai, F. Tavani, P. D'Angelo. Solubilization properties and structural characterization of dissociated HgO and HgCl₂ in deep eutectic solvents JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 329, 115505 (2021). journal IF: 6.165 citazioni: 4.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

2. V. Migliorati*, A. Gibiino, A. Lapi, M. Busato, P. D'Angelo. On the Coordination Chemistry of the lanthanum(III) Nitrate Salt in EAN/MeOH Mixtures INORGANIC CHEMISTRY 2021, 60, 10674–10685 (2021). journal IF:5.165 citazioni: 0.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

3. V. Migliorati*, A. Lapi, Paola D'Angelo. Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(III) bistriflimide salt in ionic liquid/acetonitrile mixtures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 22, 20434-20443 (2020). journal IF:3.676 citazioni: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

4. V. Migliorati*, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019). journal IF: 3.430 citazioni: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

5. V. Migliorati*, A. Caruso, Paola D'Angelo. Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825 citazioni: 6.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

6. F. Sessa, V. Migliorati*, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo. On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻-based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567 citazioni: 19.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

7. V. Migliorati*, A. Serva, F. Sessa, A. Lapi, P. D'Angelo. Influence of Counterions on the Hydration Structure of Lanthanide Ions in Dilute Aqueous Solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 122, 2779–2791 (2018). journal IF: 2.923 citazioni: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

8. V. Migliorati*, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo. Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 7.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

9. V. Migliorati*, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo. Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 36.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

10. A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo. How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 23, 8424-8433 (2017). journal IF:5.160 citazioni: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona,

11. V. Migliorati*, P. D'Angelo. Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016). journal IF: 4.857 citazioni: 22.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

12. A. Serva, V. Migliorati*, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). journal IF: 4.123 citazioni: 29.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

13. F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati*. The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015). journal IF: 3.187 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

14. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo. Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 33.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

15. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo. Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 30.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

16. V. Migliorati*, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). journal IF: 2.952 citazioni: 43.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

17. V. Migliorati*, P. D'Angelo. A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg²⁺ ion solvation properties in methanol solution RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). journal IF: 3.708 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

18. V. Migliorati*, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti. A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their

aqueous solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 40.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

19. V. Migliorati*, A. Zitolo, P. D'Angelo. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 48.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

20. P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati*. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 45.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona o molto buona (impact factor medio 4.108). L'attività di ricerca dimostra un'esperienza di ottimo livello nell'ambito della chimica computazionale relativamente allo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati attraverso approcci innovativi. Il contributo della candidata nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 17 delle 20 pubblicazioni selezionate e dalla sua collocazione come corresponding o co-corresponding author in ben 19 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: OTTIMA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica della candidata è pienamente attinente al SSD CHIM/02. La candidata dimostra una produttività scientifica alta (59 pubblicazioni e 2 capitoli di libri in 13 anni), continua nel tempo e di qualità molto buona, come mostrato complessivamente dall'impact factor medio per pubblicazione di 3.74, da un numero di citazioni medie per prodotto di 26.24 e da un valore molto alto dell' Hirsh index pari a 28. L'apporto fornito dalla candidata è testimoniato da un notevole numero di articoli in cui è presente come primo o ultimo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: OTTIMO.

COMMISSARIO 2

TITOLI

La candidata Valentina MIGLIORATI ha ottenuto il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Roma La Sapienza nel 2009. Nel periodo 2010-2020 (con brevi interruzioni anche in relazione a periodi di maternità), è stata titolare di numerosi assegni di ricerca

presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza. Dal 2021, presta servizio presso la medesima sede, nel ruolo di ricercatrice a tempo determinato di tipo A. La candidata ha partecipato ad un elevato numero congressi e workshop pertinenti al settore scientifico di riferimento, presentando contributi orali (in un caso su invito) e poster. La candidata ha inoltre partecipato o, in alcuni casi, coordinato numerosi progetti di ricerca e svolto attività di referee per riviste scientifiche internazionali.

L'attività didattica pertinente al SSD di riferimento, svolta presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma La Sapienza include numerosi incarichi per lezioni ed esercitazioni per la Laurea triennale in Chimica, la titolarità di un insegnamento per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica e di un insegnamento per il corso di dottorato in Scienze Chimiche. Alla luce dell'analisi dei titoli presentati, il profilo curricolare della candidata risulta di ottimo livello per ciò che concerne le attività didattiche svolte e la continuità temporale dell'attività di ricerca nel campo della chimica computazionale, dimostrando il raggiungimento di una completa maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: OTTIMO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. V. Migliorati*, G. Fazio, S. Pollastri, A. Gentili, P. Tomai, F. Tavani, P. D'Angelo. Solubilization properties and structural characterization of dissociated HgO and HgCl₂ in deep eutectic solvents JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 329, 115505 (2021). journal IF: 6.165 citazioni: 4.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

2. V. Migliorati*, A. Gibiino, A. Lapi, M. Busato, P. D'Angelo. On the Coordination Chemistry of the lanthanum(III) Nitrate Salt in EAN/MeOH Mixtures INORGANIC CHEMISTRY 2021, 60, 10674–10685 (2021). journal IF:5.165 citazioni: 0.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

3. V. Migliorati*, A. Lapi, Paola D'Angelo. Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(III) bistriflimide salt in ionic liquid/acetonitrile mixtures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 22, 20434-20443 (2020). journal IF:3.676 citazioni: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

4. V. Migliorati*, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019). journal IF: 3.430 citazioni: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

5. V. Migliorati*, A. Caruso, Paola D'Angelo. Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825 citazioni: 6.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

6. F. Sessa, V. Migliorati*, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo. On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻- based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567 citazioni: 19.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente.

7. V. Migliorati*, A. Serva, F. Sessa, A. Lapi, P. D'Angelo. Influence of Counterions on the Hydration Structure of Lanthanide Ions in Dilute Aqueous Solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 122, 2779–2791 (2018). journal IF: 2.923 citazioni: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

8. V. Migliorati*, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo. Structure of Water in Zn²⁺-Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 7.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

9. V. Migliorati*, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo. Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 36.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

10. A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo. How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 23, 8424-8433 (2017). journal IF:5.160 citazioni: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

11. V. Migliorati*, P. D'Angelo. Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016). journal IF: 4.857 citazioni: 22.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

12. A. Serva, V. Migliorati*, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). journal IF: 4.123 citazioni: 29.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente.

13. F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati*. The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015). journal IF: 3.187 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

14. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo. Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 33.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

15. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo. Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 30.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

16. V. Migliorati*, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). journal IF: 2.952 citazioni: 43.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

17. V. Migliorati*, P. D'Angelo. A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg²⁺ ion solvation properties in methanol solution RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). journal IF: 3.708 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

18. V. Migliorati*, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti. A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 40.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

19. V. Migliorati*, A. Zitolo, P. D'Angelo. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 48.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

20. P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati*. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 45.

VALUTAZIONE:

La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di co-autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione risultano pienamente coerenti con il SSD di riferimento e sono nella maggior parte dei casi pubblicate su riviste caratterizzate da buona o molto buona collocazione editoriale. Le pubblicazioni evidenziano un elevato livello di originalità, innovatività e rigore metodologico e documentano l'elevata maturità scientifica raggiunta nell'ambito dell'analisi delle proprietà strutturali ed elettroniche di sistemi disordinati avvalendosi di metodologie innovative basate sulla combinazione di dinamica molecolare e tecniche di caratterizzazione a raggi X. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo, come dimostrato dal ruolo di primo o ultimo autore in 17 delle 20 pubblicazioni e dal ruolo di autore o co-autore corrispondente in 19 delle 20 pubblicazioni.

La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: OTTIMA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica complessiva della candidata è pienamente coerente con il SSD CHIM/02. La produttività scientifica è molto elevata (59 articoli in riviste internazionali e due capitoli di libro nel periodo 2008–2021) e di qualità molto buona, sulla base dell'I.F. medio (3.74) per pubblicazione, nonché dell'H index pari a 28. Il contributo individuale della candidata è ottimo, come si evince dall'elevato numero di lavori pubblicati nel ruolo di primo autore o autore corrispondente.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: OTTIMO.

COMMISSARIO 3

TITOLI

La candidata Valentina MIGLIORATI ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" nel 2009. Dal 2010 al 2020, con brevi periodi di interruzione alcuni dei quali legati alla maternità la candidata è stata titolare di assegni di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Dal 2021 è ricercatrice a tempo determinato di tipo A presso lo stesso Dipartimento. Inerentemente all'attività didattica, dal 2007 al 2018 ha tenuto lezioni di esercitazioni per il corso di Chimica Fisica II per la Laurea triennale in Chimica, dal 2020 al 2022 è stata titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica e nel a.a. 2019/2020 di un insegnamento per il corso di dottorato in Scienze Chimiche, presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". La candidata ha partecipato a numerosi corsi di perfezionamento post-lauream e a molti congressi e workshop con presentazioni orali (in un caso come oratrice invitata) e poster. È stata presente in numerosi progetti come partecipante o come responsabile scientifica (in 6 casi). La candidata è stata referee di diverse riviste scientifiche internazionali ed ha svolto attività Editoriale nel 2020 per una di esse.

La candidata Valentina MIGLIORATI è in possesso di Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato in Chimica Fisica (settore concorsuale 03/A2) dal 2017. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata evidenzia un curriculum di livello ottimo, per quanto riguarda l'attività di ricerca nell'ambito della chimica computazionale e una raggiunta completa maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: OTTIMO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. V. Migliorati*, G. Fazio, S. Pollastri, A. Gentili, P. Tomai, F. Tavani, P. D'Angelo. Solubilization properties and structural characterization of dissociated HgO and HgCl₂ in deep eutectic solvents JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 329, 115505 (2021). journal IF: 6.165 citazioni: 4.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

2. V. Migliorati*, A. Gibiino, A. Lapi, M. Busato, P. D'Angelo. On the Coordination Chemistry of the lanthanum(III) Nitrate Salt in EAN/MeOH Mixtures INORGANIC CHEMISTRY 2021, 60, 10674–10685 (2021). journal IF:5.165 citazioni: 0.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

3. V. Migliorati*, A. Lapi, Paola D'Angelo. Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(III) bistriflimide salt in ionic liquid/acetonitrile mixtures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 22, 20434-20443 (2020). journal IF:3.676 citazioni: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

4. V. Migliorati*, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019). journal IF: 3.430 citazioni: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

5. V. Migliorati*, A. Caruso, Paola D'Angelo. Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825 citazioni: 6.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

6. F. Sessa, V. Migliorati*, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo. On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻ based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567 citazioni: 19.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author.

7. V. Migliorati*, A. Serva, F. Sessa, A. Lapi, P. D'Angelo. Influence of Counterions on the Hydration Structure of Lanthanide Ions in Dilute Aqueous Solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 122, 2779–2791 (2018). journal IF: 2.923 citazioni: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

8. V. Migliorati*, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo. Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 7.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

9. V. Migliorati*, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo. Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 36.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

10. A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo. How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 23, 8424-8433 (2017). journal IF: 5.160 citazioni: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

11. V. Migliorati*, P. D'Angelo. Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016). journal IF: 4.857 citazioni: 22.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

12. A. Serva, V. Migliorati*, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). journal IF: 4.123 citazioni: 29.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author

13. F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati*. The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015). journal IF: 3.187 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

14. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo. Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 33.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

15. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo. Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 30.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

16. V. Migliorati*, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). journal IF: 2.952 citazioni: 43.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

17. V. Migliorati*, P. D'Angelo. A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg²⁺ ion solvation properties in methanol solution RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). journal IF: 3.708 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

18. V. Migliorati*, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti. A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 40.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

19. V. Migliorati*, A. Zitolo, P. D'Angelo. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377

citazioni: 48.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

20. P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati*. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 45.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona o molto buona (impact factor medio 4.108). L'attività di ricerca dimostra un'esperienza di ottimo livello nell'ambito della chimica computazionale relativamente allo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati attraverso approcci innovativi, che combinano simulazioni di Dinamica Molecolare e diverse tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di assorbimento dei raggi X e la diffrazione dei raggi X. I lavori presentano un elevato grado di originalità, innovatività e rigore metodologico. Il contributo della candidata nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 17 delle 20 pubblicazioni selezionate, come pure dalla sua indicazione come corresponding o co-corresponding author in ben 19 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: **OTTIMA**.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica del candidato è pienamente attinente al SSD CHIM/02. Il candidato dimostra una produttività scientifica alta (59 pubblicazioni e 2 capitoli di libri nell'intervallo temporale 2008-2021) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 3.74; un numero di citazioni medie per prodotto di 26.24 e un Hirsh index pari a 28. I lavori sono congruenti con il bando, omogeneamente distribuiti negli anni di attività. L'apporto fornito dal candidato è testimoniato da un notevole numero di articoli in cui è presente come primo o ultimo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: **OTTIMO**.

GIUDIZIO COLLEGIALE

TITOLI

La candidata Valentina MIGLIORATI ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2009. Dal 2010 al 2020, con brevi periodi di interruzione, alcuni dei quali legati alla maternità, la candidata è stata titolare di assegni di ricerca dedicati a progetti nel settore della chimica fisica. Dal 2021 è ricercatrice a tempo determinato di tipo A. Inerentemente all'attività didattica, ha tenuto lezioni di esercitazioni per corsi di Chimica Fisica e dal 2020 è titolare

dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica. In aggiunta, nel a.a. 2019/2020 è stata titolare di un insegnamento nell'ambito del corso di dottorato in Scienze Chimiche, presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". La candidata ha partecipato a diversi corsi di perfezionamento post-lauream e a numerosi congressi e workshop con presentazioni orali (anche su invito) e poster. È stata presente in numerosi progetti come partecipante o come responsabile scientifica (in 6 casi). La candidata è stata referee di diverse riviste scientifiche internazionali ed ha svolto attività Editoriale nel 2020 per una di esse.

L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata evidenzia un curriculum di livello ottimo, per quanto riguarda l'attività di ricerca nell'ambito della chimica computazionale e una raggiunta completa maturità scientifica.

Il giudizio complessivo sui titoli è: OTTIMO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. V. Migliorati*, G. Fazio, S. Pollastri, A. Gentili, P. Tomai, F. Tavani, P. D'Angelo. Solubilization properties and structural characterization of dissociated HgO and HgCl₂ in deep eutectic solvents JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 329, 115505 (2021). journal IF: 6.165 citazioni: 4.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

2. V. Migliorati*, A. Gibiino, A. Lapi, M. Busato, P. D'Angelo. On the Coordination Chemistry of the lanthanum(III) Nitrate Salt in EAN/MeOH Mixtures INORGANIC CHEMISTRY 2021, 60, 10674–10685 (2021). journal IF:5.165 citazioni: 0.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

3. V. Migliorati*, A. Lapi, Paola D'Angelo. Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(III) bistriflimide salt in ionic liquid/acetonitrile mixtures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 22, 20434-20443 (2020). journal IF:3.676 citazioni: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

4. V. Migliorati*, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo, Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019). journal IF: 3.430 citazioni: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

5. V. Migliorati*, A. Caruso, Paola D'Angelo. Unraveling the Hydration Properties of the Ba²⁺ Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825 citazioni: 6.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

6. F. Sessa, V. Migliorati*, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo. On the coordination of Zn²⁺ ion in Tf₂N⁻ based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567 citazioni: 19.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author.

7. V. Migliorati*, A. Serva, F. Sessa, A. Lapi, P. D'Angelo. Influence of Counterions on the Hydration Structure of Lanthanide Ions in Dilute Aqueous Solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 122, 2779–2791 (2018). journal IF: 2.923 citazioni: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

8. V. Migliorati*, A. Filipponi, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo. Structure of Water in Zn²⁺ Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013–14022 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 7.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

9. V. Migliorati*, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo. Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). journal IF: 4.700 citazioni: 36.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

10. A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo. How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 23, 8424-8433 (2017). journal IF:5.160 citazioni: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

11. V. Migliorati*, P. D'Angelo. Unraveling the Sc³⁺ Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016). journal IF: 4.857 citazioni: 22.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come

dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

12. A. Serva, V. Migliorati*, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). journal IF: 4.123 citazioni: 29.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author

13. F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati*. The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729–15737 (2015). journal IF: 3.187 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

14. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo. Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 33.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

15. V. Migliorati*, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo. Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015). journal IF: 4.449 citazioni: 30.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

16. V. Migliorati*, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). journal IF: 2.952 citazioni: 43.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

17. V. Migliorati*, P. D'Angelo. A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the Hg²⁺ ion solvation properties in methanol solution RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). journal IF: 3.708 citazioni: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

18. V. Migliorati*, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti. A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 40.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

19. V. Migliorati*, A. Zitolo, P. D'Angelo. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 48.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

20. P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati*. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). journal IF: 3.377 citazioni: 45.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di co-corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 20 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione sono pienamente coerenti con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste internazionale con una rilevanza editoriale mediamente buona o molto buona (impact factor medio 4.108). L'attività di ricerca dimostra un'esperienza di ottimo livello nell'ambito della chimica computazionale. Una competenza particolarmente rilevante è mostrata nello studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati attraverso approcci innovativi, che combinano simulazioni di Dinamica Molecolare e diverse tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di assorbimento dei raggi X e la diffrazione dei raggi X. I lavori sono contraddistinti da un elevato grado di originalità e innovatività nel panorama internazionale e sono caratterizzati da grande rigore metodologico. Il contributo della candidata nei lavori presentati è particolarmente rilevante come evidenziato dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 17 delle 20 pubblicazioni selezionate, come pure dalla sua indicazione come corresponding o co-corresponding author in ben 19 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: OTTIMA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica della candidata è pienamente attinente al SSD CHIM/02. La candidata dimostra una produttività scientifica alta (59 pubblicazioni e 2 capitoli di libri nell'intervallo temporale 2008-2021) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 3.74; un numero di citazioni medie per prodotto di 26.24 e un Hirsh index pari a 28. I lavori sono congruenti con il bando, omogeneamente distribuiti negli anni di attività. L'apporto fornito dalla candidata è testimoniato da un notevole numero di articoli in cui è presente come primo o ultimo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: OTTIMO.

CANDIDATA: TAVAGNACCO Letizia

COMMISSARIO 1

TITOLI

La candidata Letizia TAVAGNACCO ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca nel 2014 presso il Dipartimento di Scienze della Vita dell'Università di Trieste. Ha avuto un contratto presso il Sincrotrone di Elettra di Trieste nel 2014. Ha vinto una borsa di studio di Federchimica presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche dell'università di Trieste e poi un postdoc presso la Cornell University . Successivamente è stata assegnista di ricerca presso l'Istituto per i Sistemi Complessi del CNR e dal 2020 è ricercatrice a tempo determinato (III livello) presso lo stesso istituto. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata evidenzia un curriculum di livello buono, per quanto riguarda l'attività di ricerca.

Il giudizio complessivo sui titoli è: BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. L. Tavagnacco, G. Corucci, Y. Gerelli Interaction of caffeine with model lipid membranes J. Phys. Chem. B., 2021, 125, 10174-10181, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c04360. Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

2. G. Del Monte, D. Truzzolillo, F. Camerin, A. Ninarello, E. Chauveau, L. Tavagnacco, N. Gnan, L. Rovigatti, S. Sennato, E. Zaccarelli Two-step deswelling in the Volume Phase Transition of thermoresponsive microgels PNAS, 2021, 118, e2109560118, DOI: 10.1073/pnas.2109560118. Journal IF: 11.205 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è ottima.

3. B. P. Rosi#, L. Tavagnacco#, L. Comez, P. Sassi, M. Ricci, E. Buratti, M. Bertoldo, C. Petrillo, E. Zaccarelli, E. Chiessi, S. Corezzi Thermoresponsivity of poly(N-isopropylacrylamide) microgels in water-trehalose solution and its relation to protein behavior J. Colloid Interface Sci., 2021, 604, 705-718, DOI: 10.1016/j.jcis.2021.07.006. Journal IF: 8.128 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

4. L. Tavagnacco, E. Chiessi, E. Zaccarelli Molecular insights on Poly(N-isopropylacrylamide) coil-to-globule transition induced by pressure Phys. Chem. Chem. Phys., 2021, 23, 5984-5991, DOI: 10.1039/D0CP06452A. Journal IF: 3.676 Citations: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

5. L. Tavagnacco, M. Zanatta, E. Buratti, B. Rosi, B. Frick, F. Natali, J. Ollivier, E. Chiessi, M. Bertoldo, E. Zaccarelli, A. Orecchini Proteinlike dynamical transition of hydrated polymer chains Phys. Rev. Research, 2021, 3, 013191, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013191. Journal IF: 0.74: 2.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

6. M. Zanatta, L. Tavagnacco*, E. Buratti, E. Chiessi, F. Natali, M. Bertoldo, A. Orecchini, E. Zaccarelli Atomic scale investigation of the volume phase transition in concentrated PNIPAM Microgels *J. Chem. Phys.*, 2020, 152, 204904, DOI: 10.1063/5.0007112. Journal IF: 3.488 Citations: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua collocazione come corresponding author.

7. L. Tavagnacco, E. Zaccarelli, E. Chiessi Molecular description of the coil-to-globule transition of Poly (N-isopropylacrylamide) in water/ethanol mixture at low alcohol concentration *J. Mol. Liq.*, 2020, 297, 111928, DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111928. Journal IF: 6.165 Citations: 14.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

8. P. E. Mason, L. Tavagnacco, M.-L. Saboungi, T. Hansen, H. E. Fischer, G. W. Neilson, T. Ichiye and J. W. Brady Molecular Dynamics and Neutron Scattering Studies of Potassium Chloride in Aqueous Solution *J. Phys. Chem. B*, 2019, 123, 10807-10813, DOI:10.1021/acs.jpcc.9b08422 Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta.

9. L. Tavagnacco, E. Chiessi, M. Zanatta, A. Orecchini and E. Zaccarelli Water-Polymer Coupling Induces a Dynamical Transition in Microgels *J. Phys. Chem. Lett.*, 2019, 10, 870-876, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b00190. Journal IF: 6.475 Citations: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

10. S. Di Fonzo, C. Bottari, J. W. Brady, L. Tavagnacco, M. Caterino, L. Petraccone, J. Amato, C. Giancola and A. Cesaro Crowding and conformation interplay on human DNA G-quadruplex by ultraviolet resonant Raman scattering *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 2093-2101, DOI: 10.1039/C8CP04728F. Journal IF: 3.676 Citations: 9.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

11. L. Rovigatti, N. Gnan, L. Tavagnacco, A. J. Moreno and E. Zaccarelli Numerical modelling of non-ionic microgels: an overview *Soft matter*, 2019, 15, 1108-1119, DOI:10.1039/C8SM02089B. Journal IF: 3.679 Citations: 49.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona,

12. M. Zanatta#, L. Tavagnacco#, E. Buratti#, M. Bertoldo, F. Natali, E. Chiessi, A. Orecchini and E. Zaccarelli Evidence of a low-temperature dynamical transition in concentrated microgels *Sci. Adv.*, 2018, 4, eaat5895, DOI: 10.1126/sciadv.aat5895. Journal IF: 14.143 Citations: 18.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

13. L. Tavagnacco* , E. Zaccarelli and E. Chiessi On the Molecular Origin of the Cooperative Coil-to-globule Transition of Poly(N-isopropylacrylamide) in Water *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 9997-10010, DOI: 10.1039/C8CP00537K. Journal IF: 3.676 Citations: 55.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come indicato dalla sua collocazione nella lista degli autori e dal fatto che è autore corrispondente

14. L. Tavagnacco, P. E. Mason, G. W. Neilson, M.-L. Saboungi, A. Cesaro and J. W. Brady Molecular dynamics and neutron scattering studies of mixed solutions of caffeine and pyridine in water *J. Phys. Chem. B.*, 2018, 122, 5308-5315, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b07798. Journal IF: 2.991 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori.

15. B. Bellich, S. Di Fonzo, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, C. Masciovecchio, F. Bertolotti, G. Giannini, R. De Zorzi, S. Geremia, A. Maiocchi, F. Uggeri, N. Masciocchi and A. Cesaro Myelography iodinated contrast media. II. Conformational versatility of iopamidol in the solid State *Mol. Pharmaceutics*, 2017, 14, 468-477, DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.6b00902. Journal IF: 4.939 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

16. L. Tavagnacco, Y. Gerelli, A. Cesaro and J. W. Brady Stacking and branching in self-aggregation of caffeine in aqueous solution: from the supramolecular to atomic scale clustering *J. Phys. Chem. B*, 2016, 120, 9987-9996, DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06980. Journal IF: 2.991 Citations: 12.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

17. L. Tavagnacco, S. Di Fonzo, F. D'Amico, C. Masciovecchio, J. W. Brady and A. Cesaro Stacking of purines in water: the role of dipolar interaction in caffeine *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 13478-13486, DOI: 10.1039/C5CP07326J. Journal IF: 3.676 Citations: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

18. L. Tavagnacco, J. W. Brady, F. Bruni, S. Callear, M.A. Ricci, M.-L. Saboungi and A. Cesaro Hydration of caffeine at high temperature by neutron scattering and simulation studies *J. Phys. Chem. B*, 2015, 119, 13294-13301, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09204. Journal IF: 2.991 Citations: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

19. L. Fontanive, N. D'Amelio, A. Cesaro, A. Gamini, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, J. W. Brady, A. Maiocchi and F. Uggeri Myelography iodinated contrast media. I. Unraveling the atropisomerism properties in solution *Mol. Pharmaceutics*, 2015, 12, 1939-1950, DOI:10.1021/mp5007486. Journal IF: 4.939 Citations: 52.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 pubblicazioni presentate

La candidata presenta solo 19 pubblicazioni rispetto alle 20 consentite. Le pubblicazioni presentate sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona o con punte di eccellenza (impact factor medio 4.924). L'attività di ricerca dimostra una notevole esperienza nell'ambito della chimica computazionale applicata a sistemi colloidali. Il contributo della candidata nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 12 delle 19 pubblicazioni selezionate, come pure dalla sua indicazione come corresponding author in 2 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica della candidata è pienamente attinente al SSD CHIM/02. La candidata dimostra una produttività scientifica discreta (24 in 10 anni), continua nel tempo e di qualità buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 4.41; un numero di citazioni medie per prodotto di 15.58 e un Hirsh index pari a 12. L'apporto fornito dalla candidata è testimoniato da un buon numero di articoli in cui è presente come primo o ultimo nome e/o corresponding author. Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

COMMISSARIO 2

TITOLI

La candidata Letizia TAVAGNACCO ha ottenuto il titolo di Dottore di Ricerca presso il Dipartimento di Scienze della Vita dell'Università di Trieste (2014) ed è stata titolare di un contratto presso Elettra Sincrotrone Trieste nello stesso anno. Successivamente, ha ottenuto una borsa di studio Federchimica, svolgendo le relative attività presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche dell'Università di Trieste. La candidata ha svolto un post-doc presso la Cornell University ed in seguito è stata assegnista di ricerca presso l'Istituto per i Sistemi Complessi del CNR. Dal 2020, la candidata ricopre la posizione di ricercatrice a tempo determinato (III livello) presso lo stesso Istituto. Alla luce dell'analisi dei titoli presentati, il profilo curricolare del candidato risulta buono per ciò che concerne la continuità temporale dell'attività di ricerca. Il giudizio complessivo sui titoli è: BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. L. Tavagnacco, G. Corucci, Y. Gerelli Interaction of caffeine with model lipid membranes J. Phys. Chem. B., 2021, 125, 10174-10181, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c04360. Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE:

La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

2. G. Del Monte, D. Truzzolillo, F. Camerin, A. Ninarello, E. Chauveau, L. Tavagnacco, N. Gnan, L. Rovigatti, S. Sennato, E. Zaccarelli Two-step deswelling in the Volume Phase Transition of thermoresponsive microgels PNAS, 2021, 118, e2109560118, DOI: 10.1073/pnas.2109560118. Journal IF: 11.205 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta ottima.

3. B. P. Rosi#, L. Tavagnacco#, L. Comez, P. Sassi, M. Ricci, E. Buratti, M. Bertoldo, C. Petrillo, E. Zaccarelli, E. Chiessi, S. Corezzi Thermoresponsivity of poly(N-isopropylacrylamide) microgels in water-trehalose solution and its relation to protein behavior J. Colloid Interface Sci., 2021, 604, 705-718, DOI: 10.1016/j.jcis.2021.07.006. Journal IF: 8.128 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione condivisa di prima autrice nella lista dei coautori.

4. L. Tavagnacco, E. Chiessi, E. Zaccarelli Molecular insights on Poly(N-isopropylacrylamide) coil-to-globule transition induced by pressure *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2021, 23, 5984-5991, DOI: 10.1039/D0CP06452A. Journal IF: 3.676 Citations: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

5. L. Tavagnacco, M. Zanatta, E. Buratti, B. Rosi, B. Frick, F. Natali, J. Ollivier, E. Chiessi, M. Bertoldo, E. Zaccarelli, A. Orecchini Proteinlike dynamical transition of hydrated polymer chains *Phys. Rev. Research*, 2021, 3, 013191, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013191. Journal IF: 0.74: 2.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

6. M. Zanatta, L. Tavagnacco*, E. Buratti, E. Chiessi, F. Natali, M. Bertoldo, A. Orecchini, E. Zaccarelli Atomic scale investigation of the volume phase transition in concentrated PNIPAM Microgels *J. Chem. Phys.*, 2020, 152, 204904, DOI: 10.1063/5.0007112. Journal IF: 3.488 Citations: 3.

VALUTAZIONE:

La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente.

7. L. Tavagnacco, E. Zaccarelli, E. Chiessi Molecular description of the coil-to-globule transition of Poly (N-isopropylacrylamide) in water/ethanol mixture at low alcohol concentration *J. Mol. Liq.*, 2020, 297, 111928, DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111928. Journal IF: 6.165 Citations: 14.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

8. P. E. Mason, L. Tavagnacco, M.-L. Saboungi, T. Hansen, H. E. Fischer, G. W. Neilson, T. Ichiye and J. W. Brady Molecular Dynamics and Neutron Scattering Studies of Potassium Chloride in Aqueous Solution *J. Phys. Chem. B*, 2019, 123, 10807-10813, DOI:10.1021/acs.jpcc.9b08422 Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta.

9. L. Tavagnacco, E. Chiessi, M. Zanatta, A. Orecchini and E. Zaccarelli Water-Polymer Coupling Induces a Dynamical Transition in Microgels *J. Phys. Chem. Lett.*, 2019, 10, 870-876, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b00190. Journal IF: 6.475 Citations: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta molto buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

10. S. Di Fonzo, C. Bottari, J. W. Brady, L. Tavagnacco, M. Caterino, L. Petraccone, J. Amato, C. Giancola and A. Cesaro Crowding and conformation interplay on human DNA G-quadruplex by ultraviolet resonant Raman scattering *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 2093-2101, DOI: 10.1039/C8CP04728F. Journal IF: 3.676 Citations: 9.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

11. L. Rovigatti, N. Gnan, L. Tavagnacco, A. J. Moreno and E. Zaccarelli Numerical modelling of non-ionic microgels: an overview *Soft matter*, 2019, 15, 1108-1119, DOI:10.1039/C8SM02089B. Journal IF: 3.679 Citations: 49.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

12. M. Zanatta#, L. Tavagnacco#, E. Buratti#, M. Bertoldo, F. Natali, E. Chiessi, A. Orecchini and E. Zaccarelli Evidence of a low-temperature dynamical transition in concentrated microgels *Sci. Adv.*, 2018, 4, eaat5895, DOI: 10.1126/sciadv.aat5895. Journal IF: 14.143 Citations: 18.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta eccellente. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione condivisa di prima autrice nella lista dei coautori.

13. L. Tavagnacco* , E. Zaccarelli and E. Chiessi On the Molecular Origin of the Cooperative Coil-to-globule Transition of Poly(N-isopropylacrylamide) in Water *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 9997-10010, DOI: 10.1039/C8CP00537K. Journal IF: 3.676 Citations: 55.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione al ruolo di autore corrispondente ad alla sua posizione nella lista dei coautori.

14. L. Tavagnacco, P. E. Mason, G. W. Neilson, M.-L. Saboungi, A. Cesaro and J. W. Brady Molecular dynamics and neutron scattering studies of mixed solutions of caffeine and pyridine in water *J. Phys. Chem. B.*, 2018, 122, 5308-5315, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b07798. Journal IF: 2.991 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

15. B. Bellich, S. Di Fonzo, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, C. Masciovecchio, F. Bertolotti, G. Giannini, R. De Zorzi, S. Geremia, A. Maiocchi, F. Uggeri, N. Masciocchi and A. Cesaro Myelography iodinated contrast media. II. Conformational versatility of iopamidol in the solid State *Mol. Pharmaceutics*, 2017, 14, 468-477, DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.6b00902. Journal IF: 4.939 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

16. L. Tavagnacco, Y. Gerelli, A. Cesaro and J. W. Brady Stacking and branching in self-aggregation of caffeine in aqueous solution: from the supramolecular to atomic scale clustering *J. Phys. Chem. B*, 2016, 120, 9987-9996, DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06980. Journal IF: 2.991 Citations: 12.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

17. L. Tavagnacco, S. Di Fonzo, F. D'Amico, C. Masciovecchio, J. W. Brady and A. Cesaro Stacking of purines in water: the role of dipolar interaction in caffeine *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 13478-13486, DOI: 10.1039/C5CP07326J. Journal IF: 3.676 Citations: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

18. L. Tavagnacco, J. W. Brady, F. Bruni, S. Callear, M.A. Ricci, M.-L. Saboungi and A. Cesaro Hydration of caffeine at high temperature by neutron scattering and simulation studies *J. Phys. Chem. B*, 2015, 119, 13294-13301, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09204. Journal IF: 2.991 Citations: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta discreta. Il contributo individuale della candidata risulta ottimo in relazione alla sua posizione nella lista dei coautori.

19. L. Fontanive, N. D'Amelio, A. Cesaro, A. Gamini, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, J. W. Brady, A. Maiocchi and F. Uggeri Myelography iodinated contrast media. I. Unraveling the atropisomerism properties in solution Mol. Pharmaceutics, 2015, 12, 1939-1950, DOI:10.1021/mp5007486. Journal IF: 4.939 Citations: 52.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il SSD di riferimento. Considerando l'I.F. della rivista, la collocazione editoriale risulta buona.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Le 19 pubblicazioni presentate ai fini della presente valutazione risultano coerenti con il SSD di riferimento e sono pubblicate su riviste caratterizzate, nella maggior parte dei casi, da una buona collocazione editoriale. Le pubblicazioni evidenziano elevata originalità, innovatività e rigore metodologico, su tematiche di ricerca riguardanti lo studio di sistemi colloidali con metodi computazionali. Il contributo individuale della candidata è dimostrato dal ruolo di primo o ultimo autore in 12 delle 19 pubblicazioni e dal ruolo di autore corrispondente in 2 delle 19 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica complessiva del candidato è coerente con il SSD CHIM/02. La produttività scientifica è discreta (24 pubblicazioni nel periodo 2011 – 2022) e di qualità molto buona, sulla base dell'I.F. medio (4.41) e del n° di citazioni medie (15.58) per pubblicazione nonché dell'H-index pari a 12. Il contributo individuale del candidato si evince da un buon numero di lavori pubblicati nel ruolo di primo autore o autore corrispondente.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

COMMISSARIO 3

TITOLI

La candidata Letizia TAVAGNACCO ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca nel 2014 presso il Dipartimento di Scienze della Vita dell'Università di Trieste. Ha avuto un contratto presso il Sincrotrone di Elettra di Trieste nel 2014. Ha vinto una borsa di studio di Federchimica nel 2014 - 2015 presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche dell'università di Trieste e poi un postdoc presso la Cornell University nel 2015-2016. Successivamente è stata assegnista di ricerca presso l'Istituto per i Sistemi Complessi del CNR e dal 2020 è ricercatrice a tempo determinato (III livello) presso lo stesso istituto. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata evidenzia un curriculum di livello buono, per quanto riguarda l'attività di ricerca.

Il giudizio complessivo sui titoli è: BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. L. Tavagnacco, G. Corucci, Y. Gerelli Interaction of caffeine with model lipid membranes J. Phys. Chem. B., 2021, 125, 10174-10181, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c04360. Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

2. G. Del Monte, D. Truzzolillo, F. Camerin, A. Ninarello, E. Chauveau, L. Tavagnacco, N. Gnan, L. Rovigatti, S. Sennato, E. Zaccarelli Two-step deswelling in the Volume Phase Transition of thermoresponsive microgels PNAS, 2021, 118, e2109560118, DOI: 10.1073/pnas.2109560118. Journal IF: 11.205 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è ottima, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

3. B. P. Rosi#, L. Tavagnacco#, L. Comez, P. Sassi, M. Ricci, E. Buratti, M. Bertoldo, C. Petrillo, E. Zaccarelli, E. Chiessi, S. Corezzi Thermoresponsivity of poly(N-isopropylacrylamide) microgels in water-trehalose solution and its relation to protein behavior J. Colloid Interface Sci., 2021, 604, 705-718, DOI: 10.1016/j.jcis.2021.07.006. Journal IF: 8.128 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione condivisa di prima autrice nella lista dei coautori

4. L. Tavagnacco, E. Chiessi, E. Zaccarelli Molecular insights on Poly(N-isopropylacrylamide) coil-to-globule transition induced by pressure Phys. Chem. Chem. Phys., 2021, 23, 5984-5991, DOI: 10.1039/D0CP06452A. Journal IF: 3.676 Citations: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

5. L. Tavagnacco, M. Zanatta, E. Buratti, B. Rosi, B. Frick, F. Natali, J. Ollivier, E. Chiessi, M. Bertoldo, E. Zaccarelli, A. Orecchini Proteinlike dynamical transition of hydrated polymer chains Phys. Rev. Research, 2021, 3, 013191, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013191. Journal IF: 0.74: 2.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

6. M. Zanatta, L. Tavagnacco*, E. Buratti, E. Chiessi, F. Natali, M. Bertoldo, A. Orecchini, E. Zaccarelli Atomic scale investigation of the volume phase transition in concentrated PNIPAM Microgels J. Chem. Phys., 2020, 152, 204904, DOI: 10.1063/5.0007112. Journal IF: 3.488 Citations: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

7. L. Tavagnacco, E. Zaccarelli, E. Chiessi Molecular description of the coil-to-globule transition of Poly (N-isopropylacrylamide) in water/ethanol mixture at low alcohol concentration J. Mol. Liq, 2020, 297, 111928, DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111928. Journal IF: 6.165 Citations: 14.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

8. P. E. Mason, L. Tavagnacco, M.-L. Saboungi, T. Hansen, H. E. Fischer, G. W. Neilson, T. Ichiye and J. W. Brady Molecular Dynamics and Neutron Scattering Studies of Potassium Chloride in Aqueous Solution J. Phys. Chem. B, 2019, 123, 10807-10813, DOI:10.1021/acs.jpcc.9b08422 Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

9. L. Tavagnacco, E. Chiessi, M. Zanatta, A. Orecchini and E. Zaccarelli Water-Polymer Coupling Induces a Dynamical Transition in Microgels *J. Phys. Chem. Lett.*, 2019, 10, 870-876, DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b00190. Journal IF: 6.475 Citations: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

10. S. Di Fonzo, C. Bottari, J. W. Brady, L. Tavagnacco, M. Caterino, L. Petraccone, J. Amato, C. Giancola and A. Cesaro Crowding and conformation interplay on human DNA G-quadruplex by ultraviolet resonant Raman scattering *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 2093-2101, DOI: 10.1039/C8CP04728F. Journal IF: 3.676 Citations: 9.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

11. L. Rovigatti, N. Gnan, L. Tavagnacco, A. J. Moreno and E. Zaccarelli Numerical modelling of non-ionic microgels: an overview *Soft matter*, 2019, 15, 1108-1119, DOI:10.1039/C8SM02089B. Journal IF: 3.679 Citations: 49.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

12. M. Zanatta#, L. Tavagnacco#, E. Buratti#, M. Bertoldo, F. Natali, E. Chiessi, A. Orecchini and E. Zaccarelli Evidence of a low-temperature dynamical transition in concentrated microgels *Sci. Adv.*, 2018, 4, eaat5895, DOI: 10.1126/sciadv.aat5895. Journal IF: 14.143 Citations: 18.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione condivisa di prima autrice nella lista dei coautori

13. L. Tavagnacco* , E. Zaccarelli and E. Chiessi On the Molecular Origin of the Cooperative Coil-to-globule Transition of Poly(N-isopropylacrylamide) in Water *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 9997-10010, DOI: 10.1039/C8CP00537K. Journal IF: 3.676 Citations: 55.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

14. L. Tavagnacco, P. E. Mason, G. W. Neilson, M.-L. Saboungi, A. Cesaro and J. W. Brady Molecular dynamics and neutron scattering studies of mixed solutions of caffeine and pyridine in water *J. Phys. Chem. B.*, 2018, 122, 5308-5315, DOI: 10.1021/acs.jpccb.7b07798. Journal IF: 2.991 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

15. B. Bellich, S. Di Fonzo, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, C. Masciovecchio, F. Bertolotti, G. Giannini, R. De Zorzi, S. Geremia, A. Maiocchi, F. Uggeri, N. Masciocchi and A. Cesaro Myelography iodinated contrast media. II. Conformational versatility of iopamidol in the solid State

Mol. Pharmaceutics, 2017, 14, 468-477, DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.6b00902. Journal IF: 4.939 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

16. L. Tavagnacco, Y. Gerelli, A. Cesaro and J. W. Brady Stacking and branching in self-aggregation of caffeine in aqueous solution: from the supramolecular to atomic scale clustering J. Phys. Chem. B, 2016, 120, 9987-9996, DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06980. Journal IF: 2.991 Citations: 12.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

17. L. Tavagnacco, S. Di Fonzo, F. D'Amico, C. Masciovecchio, J. W. Brady and A. Cesaro Stacking of purines in water: the role of dipolar interaction in caffeine Phys. Chem. Chem. Phys, 2016, 18, 13478-13486, DOI: 10.1039/C5CP07326J. Journal IF: 3.676 Citations: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

18. L. Tavagnacco, J. W. Brady, F. Bruni, S. Callear, M.A. Ricci, M.-L. Saboungi and A. Cesaro Hydration of caffeine at high temperature by neutron scattering and simulation studies J. Phys. Chem. B, 2015, 119, 13294-13301, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09204. Journal IF: 2.991 Citations: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

19. L. Fontanive, N. D'Amelio, A. Cesaro, A. Gamini, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, J. W. Brady, A. Maiocchi and F. Uggeri Myelography iodinated contrast media. I. Unraveling the atropisomerism properties in solution Mol. Pharmaceutics, 2015, 12, 1939-1950, DOI:10.1021/mp5007486. Journal IF: 4.939 Citations: 52.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

La candidata presenta solo 19 pubblicazioni rispetto alle 20 consentite. Le pubblicazioni presentate sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona o con punte di eccellenza (impact factor medio 4.924). L'attività di ricerca dimostra una notevole esperienza nell'ambito della chimica computazionale applicata a sistemi colloidali ed è caratterizzata da un elevato grado di originalità, innovatività e rigore metodologico. Il contributo della candidata nei lavori presentati si può estrapolare dalla sua presenza come primo o ultimo autore in 12 delle 19 pubblicazioni selezionate, come pure dalla sua indicazione come corresponding author in 2 pubblicazioni. La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica della candidata è pienamente attinente al SSD CHIM/02. La candidata dimostra una produttività scientifica discreta (24 pubblicazioni nell'intervallo temporale 2011-2022) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 4.41; un numero di citazioni medie per prodotto di 15.58 e un Hirsh index pari a 12. I lavori sono congruenti con il bando, omogeneamente distribuiti negli anni di attività. L'apporto fornito dalla candidata è testimoniato da un buon numero di articoli in cui è presente come primo o ultimo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

GIUDIZIO COLLEGALE

TITOLI

La candidata Letizia TAVAGNACCO ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Nanotecnologie nel 2014. Successivamente ha avuto un contratto presso il Sincrotrone di Elettra a Trieste, nel 2014, e una borsa di studio, nel 2014 – 2015, presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche dell'Università di Trieste. Ha fatto un'esperienza all'estero attraverso un postdoc presso la Cornell University nel 2015-2016, per poi ottenere un assegno di ricerca presso l'Istituto per i Sistemi Complessi del CNR. Presso lo stesso istituto, dal 2020, la candidata è ricercatrice a tempo determinato. L'analisi dei titoli prodotti dalla candidata evidenzia un curriculum di livello buono, per quanto riguarda l'attività di ricerca.

Il giudizio complessivo sui titoli è: BUONO.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE:

1. L. Tavagnacco, G. Corucci, Y. Gerelli Interaction of caffeine with model lipid membranes J. Phys. Chem. B., 2021, 125, 10174-10181, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c04360. Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

2. G. Del Monte, D. Truzzolillo, F. Camerin, A. Ninarello, E. Chauveau, L. Tavagnacco, N. Gnan, L. Rovigatti, S. Sennato, E. Zaccarelli Two-step deswelling in the Volume Phase Transition of thermoresponsive microgels PNAS, 2021, 118, e2109560118, DOI: 10.1073/pnas.2109560118. Journal IF: 11.205 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è ottima, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

3. B. P. Rosi#, L. Tavagnacco#, L. Comez, P. Sassi, M. Ricci, E. Buratti, M. Bertoldo, C. Petrillo, E. Zaccarelli, E. Chiessi, S. Corezzi Thermoresponsivity of poly(N-isopropylacrylamide) microgels in water-trehalose solution and its relation to protein behavior J. Colloid Interface Sci., 2021, 604, 705-718, DOI: 10.1016/j.jcis.2021.07.006. Journal IF: 8.128 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione condivisa di prima autrice nella lista dei coautori

4. L. Tavagnacco, E. Chiessi, E. Zaccarelli Molecular insights on Poly(N-isopropylacrylamide) coil-to-globule transition induced by pressure *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2021, 23, 5984-5991, DOI: 10.1039/D0CP06452A. Journal IF: 3.676 Citations: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

5. L. Tavagnacco, M. Zanatta, E. Buratti, B. Rosi, B. Frick, F. Natali, J. Ollivier, E. Chiessi, M. Bertoldo, E. Zaccarelli, A. Orecchini Proteinlike dynamical transition of hydrated polymer chains *Phys. Rev. Research*, 2021, 3, 013191, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013191. Journal IF: 0.74: 2.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

6. M. Zanatta, L. Tavagnacco*, E. Buratti, E. Chiessi, F. Natali, M. Bertoldo, A. Orecchini, E. Zaccarelli Atomic scale investigation of the volume phase transition in concentrated PNIPAM Microgels *J. Chem. Phys.*, 2020, 152, 204904, DOI: 10.1063/5.0007112. Journal IF: 3.488 Citations: 3.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author.

7. L. Tavagnacco, E. Zaccarelli, E. Chiessi Molecular description of the coil-to-globule transition of Poly (N-isopropylacrylamide) in water/ethanol mixture at low alcohol concentration *J. Mol. Liq*, 2020, 297, 111928, DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111928. Journal IF: 6.165 Citations: 14.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

8. P. E. Mason, L. Tavagnacco, M.-L. Saboungi, T. Hansen, H. E. Fischer, G. W. Neilson, T. Ichiye and J. W. Brady Molecular Dynamics and Neutron Scattering Studies of Potassium Chloride in Aqueous Solution *J. Phys. Chem. B*, 2019, 123, 10807-10813, DOI:10.1021/acs.jpcc.9b08422 Journal IF: 2.991 Citations: 1.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

9. L. Tavagnacco, E. Chiessi, M. Zanatta, A. Orecchini and E. Zaccarelli Water-Polymer Coupling Induces a Dynamical Transition in Microgels *J. Phys. Chem. Lett.*, 2019, 10, 870-876, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b00190. Journal IF: 6.475 Citations: 16.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è molto buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione nella lista dei coautori

10. S. Di Fonzo, C. Bottari, J. W. Brady, L. Tavagnacco, M. Caterino, L. Petraccone, J. Amato, C. Giancola and A. Cesaro Crowding and conformation interplay on human DNA G-quadruplex by ultraviolet resonant Raman scattering *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 2093-2101, DOI: 10.1039/C8CP04728F. Journal IF: 3.676 Citations: 9.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

11. L. Rovigatti, N. Gnan, L. Tavagnacco, A. J. Moreno and E. Zaccarelli Numerical modelling of non-ionic microgels: an overview *Soft matter*, 2019, 15, 1108-1119, DOI:10.1039/C8SM02089B. Journal IF: 3.679 Citations: 49.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

12. M. Zanatta#, L. Tavagnacco#, E. Buratti#, M. Bertoldo, F. Natali, E. Chiessi, A. Orecchini and E. Zaccarelli Evidence of a low-temperature dynamical transition in concentrated microgels *Sci. Adv.*, 2018, 4, eaat5895, DOI: 10.1126/sciadv.aat5895. Journal IF: 14.143 Citations: 18.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è eccellente, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione condivisa di prima autrice nella lista dei coautori

13. L. Tavagnacco* , E. Zaccarelli and E. Chiessi On the Molecular Origin of the Cooperative Coil-to-globule Transition of Poly(N-isopropylacrylamide) in Water *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 9997-10010, DOI: 10.1039/C8CP00537K. Journal IF: 3.676 Citations: 55.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua indicazione di corresponding author e dalla sua posizione nella lista dei coautori

14. L. Tavagnacco, P. E. Mason, G. W. Neilson, M.-L. Saboungi, A. Cesaro and J. W. Brady Molecular dynamics and neutron scattering studies of mixed solutions of caffeine and pyridine in water *J. Phys. Chem. B.*, 2018, 122, 5308-5315, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b07798. Journal IF: 2.991 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

15. B. Bellich, S. Di Fonzo, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, C. Masciovecchio, F. Bertolotti, G. Giannini, R. De Zorzi, S. Geremia, A. Maiocchi, F. Uggeri, N. Masciocchi and A. Cesaro Myelography iodinated contrast media. II. Conformational versatility of iopamidol in the solid State *Mol. Pharmaceutics*, 2017, 14, 468-477, DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.6b00902. Journal IF: 4.939 Citations: 5.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

16. L. Tavagnacco, Y. Gerelli, A. Cesaro and J. W. Brady Stacking and branching in self-aggregation of caffeine in aqueous solution: from the supramolecular to atomic scale clustering *J. Phys. Chem. B.*, 2016, 120, 9987-9996, DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06980. Journal IF: 2.991 Citations: 12.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

17. L. Tavagnacco, S. Di Fonzo, F. D'Amico, C. Masciovecchio, J. W. Brady and A. Cesaro Stacking of purines in water: the role of dipolar interaction in caffeine *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 13478-13486, DOI: 10.1039/C5CP07326J. Journal IF: 3.676 Citations: 20.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal

Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

18. L. Tavagnacco, J. W. Brady, F. Bruni, S. Callear, M.A. Ricci, M.-L. Saboungi and A. Cesaro Hydration of caffeine at high temperature by neutron scattering and simulation studies J. Phys. Chem. B, 2015, 119, 13294-13301, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09204. Journal IF: 2.991 Citations: 21.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è discreta, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science. La candidata ha fornito un ottimo contributo, come dimostrato dalla sua posizione di prima autrice nella lista dei coautori

19. L. Fontanive, N. D'Amelio, A. Cesaro, A. Gamini, L. Tavagnacco, M. Paolantoni, J. W. Brady, A. Maiocchi and F. Uggeri Myelography iodinated contrast media. I. Unraveling the atropisomerism properties in solution Mol. Pharmaceutics, 2015, 12, 1939-1950, DOI:10.1021/mp5007486. Journal IF: 4.939 Citations: 52.

VALUTAZIONE: La pubblicazione è coerente con il settore disciplinare. La collocazione della rivista è buona, tenendo conto dell'I.F. e del posizionamento della rivista nei quartili del Journal Citation Report (JCR) di Web of Science.

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA:

VALUTAZIONE DELLE 20 PUBBLICAZIONI PRESENTATE

La candidata presenta solo 19 pubblicazioni rispetto alle 20 consentite. Le pubblicazioni presentate sono caratterizzate da una piena coerenza con il SSD CHIM/02 e sono pubblicate su riviste con una rilevanza editoriale mediamente buona (impact factor medio 4.924) con punte di eccellenza. L'attività di ricerca dimostra una notevole esperienza nell'ambito della chimica computazionale applicata alla materia soffice ed è caratterizzata da un elevato grado di originalità, innovatività e rigore metodologico. Il contributo della candidata nei lavori presentati è rilevante come estrapolabile dalla frequenza con cui compare come prima o ultima autrice (in 12 delle 19 pubblicazioni selezionate) come pure dal suo ruolo di corresponding author (in 2 pubblicazioni). La valutazione sulle pubblicazioni presentate è nel complesso: BUONA.

VALUTAZIONE SULLA PRODUZIONE COMPLESSIVA

La produzione scientifica della candidata è pienamente attinente al SSD CHIM/02. La candidata dimostra una produttività scientifica discreta (24 pubblicazioni nell'intervallo temporale 2011-2022) e di qualità molto buona, come mostrato dall'impact factor medio per pubblicazione di 4.41; dal numero di citazioni medie per prodotto di 15.58 e da un Hirsh index pari a 12. I lavori sono congruenti con il bando, omogeneamente distribuiti negli anni di attività. L'apporto fornito dalla candidata è testimoniato da un buon numero di articoli in cui è presente come primo o ultimo nome e/o corresponding author.

Il giudizio della produzione complessiva, pertanto, è: BUONO.

La Commissione termina i propri lavori alle ore 22:00

Letto, approvato e sottoscritto.

Firma del Commissari

- Prof.ssa Angela Agostiano – (Presidente)
- Prof.ssa Elisa Borfecchia – (Componente)
- Prof. Luciano Galantini – (Segretario);