

VALUTAZIONE COMPARATIVA PER TITOLI E DISCUSSIONE PUBBLICA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 3 LETTERA A) DELLA L. 240/10 (JUNIOR) EMANATO CON D.D. 2247 DEL 27/04/2018 E IL CUI AVVISO E' STATO PUBBLICATO SULLA G.U. - 4° SERIE SPECIALE - N. 34 DEL 27/04/2018

Verbale della II° adunanza

Il giorno 22 giugno 2018 alle ore 14:00 presso lo studio del Prof. Riccardo Tarroni, del Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari" dell'Università di Bologna, presso la sede "Navigare Necesse" sita in Via Dei Mille n. 39, Rimini, si riunisce in seconda adunanza la Commissione giudicatrice della valutazione comparativa per titoli e discussione pubblica per il reclutamento di un ricercatore con rapporto di lavoro a tempo determinato di cui all'art. 24 co. 3 lettera a (junior) della durata di tre anni, per le esigenze del Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari" CHIMIND, con regime di impegno a tempo pieno per il Settore Concorsuale 03/A2 -Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, per il Settore scientifico disciplinare CHIM/02 -Chimica Fisica.

Il componente della Commissione Prof. Stefano Corni dichiara preliminarmente di avvalersi di strumenti telematici di lavoro collegiali per la seduta del concorso.

Il componente della Commissione Prof.ssa Elisabetta Venuti dichiara preliminarmente di avvalersi di strumenti telematici di lavoro collegiali per la seduta del concorso.

Sono presenti i seguenti membri della Commissione giudicatrice nominata con D.D. 2847 del 30/05/2018 :

Componente: Prof. Stefano Corni – Professore Ordinario presso l'Università degli Studi di Padova (dalla propria postazione telematica);

Componente: Prof. Riccardo Tarroni – Professore Associato presso l'Università di Bologna;

Componente: Prof.ssa Elisabetta Venuti – Professoressa Associata presso l'Università di Bologna (dalla propria postazione telematica);

La procedura di valutazione è stata bandita con Decreto Dirigenziale n. 2247 del 27/04/2018. L'avviso della procedura è stato pubblicato sulla G.U. – 4° serie speciale - n. 34 del 27/04/2018, sul portale d'Ateneo, su quello del Miur e su quello europeo della ricerca.

Le domande, i curricula e le pubblicazioni di ciascun candidato sono state rese disponibili in formato elettronico dal Responsabile del procedimento via mail, attraverso l'applicativo Filesender gestito da Cineca, in data 13/06/2018.

Il Presidente dichiara aperta la seduta e dà atto che le modalità di attribuzione del punteggio sono state definite nella prima riunione tenutasi in data 6 Giugno 2018, il cui verbale è stato pubblicato sul portale d'ateneo.

La Commissione passa all'esame delle singole domande pervenute, dichiarando che non esistono situazioni di incompatibilità ai sensi degli artt. 51 e 52 del Codice di procedura civile, così come previsto dall'art. 11, 1° comma, del D.P.R. n. 487/1994. La Commissione dichiara, inoltre, che non esistono vincoli di parentela o di affinità entro il IV grado incluso o stato di coniugio tra i componenti della Commissione ed i candidati.

Il Presidente raccoglie quindi i giudizi individuali dei commissari, relativi ai partecipanti ammessi alla selezione. Tali giudizi sono contenuti nell'Allegato 2.

RT

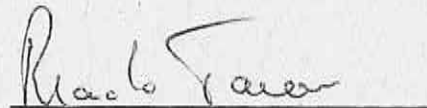
La commissione redige quindi il giudizio collegiale relativo a ciascun partecipante alla selezione. Tali giudizi collegiali sono contenuti nell'Allegato 2.

Il Presidente rilegge il verbale della seduta ai colleghi della Commissione e alle ore 16:10 la Commissione, considerati conclusi i lavori, si aggiorna per il giorno 04 Luglio 2018 alle ore 9:30 per la discussione pubblica.

Il presente verbale è integrato dalle dichiarazioni di adesione al documento, fatta pervenire dai componenti la commissione di valutazione Prof. Stefano Corni e Prof.ssa Elisabetta Venuti

Rimini, 22 Giugno 2018

PRESIDENTE Prof. Riccardo Tarroni

A handwritten signature in black ink, appearing to read "Riccardo Tarroni", is written over a horizontal line.

ALLEGATO 2)

Giudizio su titoli, pubblicazioni ed eventuali lettere di referenze

Candidato: Dott.ssa Conti Irene

Nata a [REDACTED]

Giudizi individuali

Presidente: Prof. Riccardo Tarroni

La Dott.ssa Irene Conti ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche chimica presso l'Università di Bologna nel 2008. Dal 2008 al 2017 ha svolto la sua attività di ricerca come assegnista con continuità presso l'Università di Bologna, tenuto conto dei tre congedi per gravidanza. La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica computazionale quantistica. Tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02 e presentano una buona continuità scientifica. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 22 articoli su riviste indicizzate ISI, di cui 16 ad alto fattore di impatto. Di 12 articoli la Dott.ssa Conti risulta primo autore. L' H-index della sua produzione complessiva è 9. E' prima autrice o corresponding author di 8 dei lavori presentati. Ha inoltre partecipato a convegni nazionali e internazionali. Possiede esperienza didattica continuativa come tutor di laboratorio di calcolo ed è stata co-relatrice di 3 tesi. Il giudizio complessivo sulla candidata è molto buono.

Commissario: Prof. Stefano Corni

Dottorato in Chimica presso l'Università di Bologna (2008) con una tesi dal titolo "*Fotofisica e Fotochimica di Sistemi Organici Coniugati di Interesse Biologico e Tecnologico*" pienamente congruente con il settore SSD CHIM/02. Continuativa attività come assegnista di ricerca dal 2008 al 2017 (periodo che include tre congedi di maternità) presso la stessa Università su tematiche attinenti il SSD CHIM/02, dal 2017 a oggi visiting presso la stessa Università. Prima e corresponding author di 2 dei lavori presentati, e prima autrice in altri 6. Tutti i lavori presentati sono congruenti al SSD CHIM/02. La produzione scientifica complessiva consiste di 16 articoli in riviste ISI e 6 atti di convegno indicizzati da ISI, ed è congruente con il SSD CHIM/02. 1 contributo orale a congresso. Le lettere di referenza attestano la notorietà internazionale della candidata.

Esperienza didattica: continuativa dal 2007 come assistente in laboratorio pertinente al settore CHIM/02, co-relatrice di 2 tesi triennali e di una magistrale.

Il giudizio complessivo sulla candidata è buono

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

La Dott.ssa Irene Conti ha conseguito la laurea in Chimica presso l'Università di Bologna nel 2004 e il dottorato in chimica presso lo stesso Ateneo nel 2008 con una tesi dal titolo "*Fotofisica e Fotochimica di Sistemi Organici Coniugati di Interesse Biologico e Tecnologico*". Dal 2008 al 2017 ha svolto la sua attività di ricerca come assegnista presso i Dipartimenti di Chimica e di Chimica Industriale di UNIBO, dove ancora lavora. La sua ricerca si sviluppa nel campo della chimica teorica e computazionale per lo studio della fotochimica di sistemi complessi, con l'applicazione di metodi puramente quantomeccanici QM e/o di tecniche ibride in cui l'approccio quantomeccanico si combina a quello classico della meccanica molecolare (QM/MM) per la descrizione dell'ambiente del sistema. La lettera di referenza attesta la sua larga esperienza dei metodi applicati e dei molti sistemi trattati. Fra i sistemi studiati: evoluzione e decadimento di stati eccitati in basi azotate di DNA; sistemi retinali; sistemi azobenzenici. Fra i 12 lavori presentati, 6 sono a primo nome (di cui 4 su JACS) e in altri 2 la candidata è insieme primo e corresponding author. La Dott.ssa Conti complessivamente ha una produzione scientifica di 22 lavori a stampa tutti indicizzati ISI, con 16 articoli in riviste ad alto fattore di impatto. La produzione mostra piena congruenza con l'SSD CHIM02, e buona continuità, tenuto conto dei tre congedi per maternità, ed è pertanto molto apprezzabile che ben 7 delle 12 pubblicazioni presentate siano nell'intervallo temporale 2015-2018. Nel complesso la produzione scientifica è di ottimo livello, nel contesto internazionale di riferimento, in quanto a qualità, rigore metodologico e

originalità e di rilevanza ai fini dell'impegno scientifico previsto. Ha partecipato a una serie di convegni nazionali e internazionali. Ha esperienza didattica continuativa dal 2007 a oggi come assistente in laboratorio di calcolo ed è stata co-relatrice di 2 tesi triennali e una magistrale. Il giudizio complessivo sulla candidata è molto buono.

Giudizio collegiale

La candidata Dott.ssa Conti Irene ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Bologna nel 2008 con una tesi dal titolo "*Fotofisica e Fotochimica di Sistemi Organici Coniugati di Interesse Biologico e Tecnologico*". Dal 2008 al 2017 ha svolto la sua attività di ricerca come assegnista con continuità presso l'Università di Bologna, tenuto conto delle interruzioni dovute ai tre congedi per maternità. La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica computazionale quantistica. Tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02 e presentano una buona continuità temporale e scientifica. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 22 articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto. E' prima autrice o corresponding author di 8 dei lavori presentati. Ha inoltre partecipato a convegni nazionali e internazionali. Possiede esperienza didattica continuativa come tutor di laboratorio di calcolo ed è stata co-relatrice di 3 tesi. Il giudizio complessivo sulla candidata è molto buono.

Candidato: Dr. Guido Ciro Achille

Nato a XXXXXXXXXX

Giudizi individuali

Presidente: Prof. Riccardo Tarroni

Il Dr. Ciro Achille Guido ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca nel 2011 presso la Scuola Normale Superiore di Pisa. Ha svolto circa un anno di attività post-dottorato presso l'École Polytechnique Fédérale di Losanna (CH). E' stato poi ricercatore presso il CNRS-Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation des Solides (Francia). Nel periodo 07/2014 – 07/2016 ha fruito di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale di Pisa (progetto ERC EnLight). Dal 2016 al presente lavora come senior post-doctor presso il CEISAM dell'Università di Nantes (Francia). La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e della chimica computazionale quantistica e tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 26 articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto e di un capitolo di libro. Il H-index della sua produzione complessiva è 14. Ha inoltre partecipato attivamente a numerosi congressi internazionali, con 9 comunicazioni orali di cui 3 su invito. E' primo autore o corresponding author di 8 dei lavori presentati. L'attività didattica svolta non è particolarmente estesa. E' da mettere in evidenza inoltre che il candidato ha conseguito in Francia il titolo di Maitre de Conference per i quadrienni 2014-2018 e 2018-2022. Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono

Commissario: Prof. Stefano Corni

Perfezionamento (equivalente al Dottorato) nel 2011 presso la Scuola Normale Superiore con una tesi dal titolo "*TD-DFT and TD-DFT/PCM approaches to molecular electronic excited states in gas phase and in solution*" pienamente congruente con il settore SSD CHIM/02. Dal 2011 ha svolto continuativamente attività post-dottorale (EPFL Losanna (CH); CNRS Parigi (FR). Università di Pisa, Università di Nantes (FR)) pertinente al settore SSD CHIM/02. Ha fatto parte del team del progetto ERC EnLight, è co-PI dei progetti di post-dottorato francesi EE-Fate e FCPol-Resp. Primo e corresponding author di 5 dei lavori presentati e primo autore di ulteriori 3. Tutti i lavori sono congruenti al SSD CHIM/02. La produzione scientifica complessiva



consiste di 26 articoli su riviste ISI e di un capitolo di libro, tutti congruenti al SSD CHIM/02. 9 comunicazioni orali a congressi internazionali (di cui 3 su invito). Le lettere di referenza attestano l'ottima reputazione internazionale del candidato.

Attività didattica: Esercitazioni per corso attinente al SSD CHIM/02; co-supervisore di una tesi di dottorato e di una di master. Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

Il Dr. Ciro Achille Guido ha studiato chimica presso l'Università di Pisa nel 2007 e ha conseguito il titolo di Dottore di ricerca nel 2011 presso la Scuola Normale Superiore con una tesi dal titolo "*TD-DFT and TD-DFT/PCM approaches to molecular electronic excited states in gas phase and in solution*". Da Maggio 2011° a Luglio 2012 ha svolto attività di post-dottorato presso l'École Polytechnique Fédérale di Losanna (CH); da Settembre 2012 a Giugno 2014 è stato ricercatore presso il CNRS- Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation des Solides (Francia). Da Luglio 2014 al Luglio 2016 è stato assegnista presso il Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale di Pisa (progetto ERC EnLight); dal 2016 al presente lavora presso il CEISAM dell'Università di Nantes (Francia), come post-doctor senior nell'ambito dei progetti francesi EE-Fate e FCPol-Resp di cui è Co-PI. Ha conseguito la *qualification* francese al ruolo di maitre-de-conference" per i quadrienni 2014-2018 e 2018-2022. Nel corso negli anni il candidato si è occupato dello sviluppo e dell'implementazione di: metodi volti alla razionalizzazione di funzionali DFT per la descrizione di proprietà e transizioni di stato eccitato di sistemi molecolari e supramolecolari; modelli multiscala basati su combinazione di metodi DFT e classico; modelli per la simulazione dell'effetto dell'intorno in processi di rilassamento di stato eccitato. E' autore di 26 articoli su riviste ISI e di un capitolo di libro, tutti congruenti al SSD CHIM02. E' primo e corresponding author di 5 dei lavori presentati per la valutazione e primo autore di 3. Fra le partecipazioni a congressi e workshop nazionali e internazionali sono incluse 9 comunicazioni orali (2 a invito in Francia, 1 in Italia). E' stato co-supervisore di una tesi di dottorato e di una di master.

Il Dr Guido ha preso parte a numerosi progetti, come attestato dalle lettere di presentazione allegate e il suo curriculum rispecchia un'attiva personalità scientifica.

Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono

Giudizio collegiale

Il candidato Dr. Guido Ciro Achille ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca nel 2011 presso la Scuola Normale Superiore di Pisa, con una tesi dal titolo "*TD-DFT and TD-DFT/PCM approaches to molecular electronic excited states in gas phase and in solution*". Ha svolto circa un anno di attività post-dottorato presso l'École Polytechnique Fédérale di Losanna (CH). E' stato poi ricercatore presso il CNRS-Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation des Solides (Francia). Il candidato ha inoltre conseguito in Francia l'abilitazione al ruolo di Maitre de Conference per i quadrienni 2014-2018 e 2018-2022. Nel periodo 07/2014 - 07/2016 ha fruito di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale di Pisa (progetto ERC EnLight). Dal 2016 al presente lavora come senior post-doctor presso il CEISAM dell'Università di Nantes (Francia). La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e della chimica computazionale quantistica e tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 26 articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto e di un capitolo di libro. Ha inoltre partecipato attivamente a numerosi congressi internazionali, con 9 comunicazioni orali di cui 3 su invito. E' primo autore o corresponding author di 8 dei lavori presentati. L'attività didattica svolta non è particolarmente estesa. Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono



Candidato: Dr. Mendola Daniele

Nato a [redacted]

Giudizi Individuali

Presidente: Prof. Riccardo Tarroni

Il Dott. Daniele Mendola ha conseguito il Dottorato in Chimica Industriale e Ingegneria Chimica, parzialmente congruente con il settore SSD CHIM/02, presso il Politecnico di Milano. Successivamente ha svolto attività come assegnista presso lo stesso ateneo, su tematiche parzialmente congruenti con il settore SSD CHIM/02. La sua attività di ricerca si colloca prevalentemente nel settore della Chimica Inorganica. Delle 8 pubblicazioni presentate, in 3 figura come primo autore. Tuttavia le pubblicazioni sono solo parzialmente congruenti al SSD CHIM/02. Non ha svolto attività didattica a livello universitario. Esperienza didattica: non presente a livello universitario. Il giudizio complessivo sul candidato è sufficiente

Commissario: Prof. Stefano Corni

Dottorato in Chimica Industriale e Ingegneria Chimica presso il Politecnico di Milano nel 2014, parzialmente congruente con il settore SSD CHIM/02. Da maggio 2014 ad aprile 2015 assegnista di ricerca presso l'Università di Milano, su tematiche congruenti con il settore SSD CHIM/02. Presenta 3 pubblicazioni come primo autore. I lavori presentati sono parzialmente congruenti al settore SSD CHIM/02. La produzione complessiva consiste di tali 8 articoli, ed è solo parzialmente congruente al settore SSD CHIM/02. 1 contributo orale a congresso. Le lettere di referenza attestano la notorietà internazionale del candidato. Esperienza didattica: non presente a livello universitario
Il giudizio complessivo sul candidato è sufficiente

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

Il Dr. Daniele Mendola ha conseguito la laurea specialistica in Chimica presso l'Università di Pisa nel 2010 e il dottorato presso il Politecnico di Milano nel 2014 con tesi dal titolo: "*Novel environments for metal ions: coordination complexes of azahelicenes and metal-containing ionic liquids*", solo parzialmente attinente al SSD CHIM02. Assegnista di ricerca presso il laboratorio SMART MAT di UNIMI per 1 anno (2014-2015), ha successivamente (2015-2016) ottenuto una borsa di studio nell'ambito del progetto ELIOTROPO per materiali e soluzioni per sistemi fotovoltaici e ha poi lavorato come docente di matematica e scienze nella scuola secondaria di primo grado.

L'attività di ricerca del dottor Mendola si è svolta prevalentemente in ambito sperimentale e si è focalizzata nel periodo di dottorato su sintesi e caratterizzazione di eliceni e etero-eliceni.

Presenta 8 pubblicazioni a stampa, la più recente del 2016 e due partecipazioni a congressi. Alcuni lavori sono su riviste ISI a alto fattore di impatto, ma la produzione è limitata, rispecchiando la non vasta esperienza del candidato, e nel complesso non completamente congruente al SSD CHIM02.

Il giudizio complessivo sul candidato è sufficiente.

Giudizio collegiale

Il candidato Dott. Mendola Daniele ha conseguito nel 2014 il Dottorato in Chimica Industriale e Ingegneria Chimica, con tesi dal titolo: "*Novel environments for metal ions: coordination complexes of azahelicenes and metal-containing ionic liquids*", solo parzialmente congruente con il settore SSD CHIM/02, presso il Politecnico di Milano. Successivamente ha svolto attività come assegnista presso lo stesso ateneo, su tematiche parzialmente congruenti con il settore SSD CHIM/02. La sua attività di ricerca si colloca prevalentemente nel settore della Chimica Inorganica. Delle 8 pubblicazioni presentate, in 3 figura come primo autore. Tuttavia le pubblicazioni sono solo parzialmente congruenti al SSD CHIM/02. Non ha svolto attività didattica a livello universitario. Il giudizio complessivo sul candidato è sufficiente

RT

Candidato: Dr. Nenov Artur

Nato a [REDACTED]

Giudizi individuali

Presidente: Prof. Riccardo Tarroni

Il Dr. Artur Nenov ha conseguito nel 2012 il titolo di Dottore di Ricerca in Chimica presso l'Università Ludwig Maximilian di Monaco e dal 2012 in poi ha continuativamente ricoperto la posizione di assegnista di ricerca presso l'Università di Bologna. La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e della chimica computazionale quantistica e tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02. È inoltre primo autore oppure corresponding author di 8 dei lavori presentati. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 48 lavori tra articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto, conference proceedings e capitoli su libro. Il H-index della sua produzione complessiva è 15. Inoltre ha partecipato attivamente a numerosi congressi internazionali, con 8 comunicazioni orali. Ha conseguito il premio Dr. Klaus Romer-Stiftung per la tesi di dottorato e il premio Eolo Scrocco per la Chimica Teorica. La sua esperienza didattica è suddivisa in assistenza in corsi di laboratorio di chimica computazionale e co-supervisione di tesi di dottorato, di master e di studenti Erasmus. È da evidenziare inoltre il fatto che ha ottenuto recentemente l'abilitazione ASN per la seconda fascia nel settore 03/A2. Il giudizio complessivo sul candidato è ottimo.

Commissario: Prof. Stefano Corni

Dottorato presso l'Università Ludwig Maximilian di Monaco (Germania) nel 2012, con una tesi dal titolo "*Relation between structure and ultrafast photoreactivity with application to molecular switches*", pienamente congruente con il settore SSD CHIM/02. Continuativamente assegnista di ricerca presso l'Università di Bologna dal 2012 su tematiche pertinenti il SSD CHIM 02. Premio Dr. Klaus Romer-Stiftung per la tesi di dottorato (2013); premio Eolo Scrocco della SCI (Chimica Teorica e Computazionale) nel 2016. Ha partecipato al team del programma ERC Advanced Grant STRATUS. Primo autore di 4 dei lavori presentati, corresponding author di ulteriori 4 e insieme primo e corresponding author di 1. Tutti i lavori presentati sono congruenti al SSD CHIM02. La produzione complessiva consiste di 42 articoli su riviste ISI e di un articolo su libro. 8 presentazioni orali a congressi internazionali. Le lettere di referenza attestano l'ottima reputazione internazionale del candidato.

Esperienza didattica: assistente in corsi di laboratorio congruenti all'SSD CHIM02, co-supervisore di una tesi di dottorato e di una di master; supervisore di studenti Erasmus.

Il giudizio complessivo sul candidato è ottimo.

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

Il Dr. Artur Nenov ha studiato chimica presso l'Università Ludwig Maximilian di Monaco (Germania) e presso la stessa Università ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca nel 2012 (summa cum Laude), con una tesi dal titolo "*Relation between structure and ultrafast photoreactivity with application to molecular switches*". Dal 2012 ricopre la posizione di assegnista di Ricerca presso l'Università di Bologna. Nel 2013 ha conseguito il premio Dr. Klaus Romer-Stiftung per la tesi di dottorato; nel 2016 il premio Eolo Scrocco per la Chimica Teorica. Nel 2018 ha ottenuto l'abilitazione ASN per la seconda fascia nel settore 03/A2. La sua attività di ricerca si colloca tutta nel campo della chimica teorica. Nei primi anni ha riguardato soprattutto studi di fotofisica e fotoreattività in sistemi con potenziali applicazioni nell'ambito dei dispositivi logici e di raccolta di energia solare, tramite lo sviluppo di strategie per la predizione di intersezioni coniche. Successivamente, nell'ambito del programma ERC Advanced Grant STRATUS, il candidato ha lavorato allo sviluppo di metodi ab-initio per la modellazione di proprietà elettroniche di sistemi molecolari per la simulazione di spettroscopie ultraveloci e 2D. In questo contesto ha sviluppato un approccio teorico applicabile a numerosi

15

processi fotoindotti per la comprensione dei risultati sperimentali. Ha inoltre ampiamente lavorato nello sviluppo e nell'applicazione del codice COBRAMM.

È primo autore di 4 dei lavori presentati, corresponding author di ulteriori 4 e insieme primo e corresponding author di 1. Tutti i lavori sono congruenti al SSD CHIM02. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 42 articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto e di un articolo su libro. Presenta numerose partecipazioni a congressi internazionali, con 8 presentazioni orali. Ha numerose collaborazioni con prestigiosi gruppi di ricerca in ambito internazionale, come attestato dalla sua produzione scientifica e dalle lettere di presentazione allegate.

Nel complesso, il Dr. Nenov presenta un brillante curriculum che evidenzia un'intensa attività nell'ambito della chimica teorica e computazionale per la modellazione di processi complessi. Da rilevare come l'approccio computazionale sia spesso caratterizzato da un forte aggancio al confronto con risultati sperimentali.

Ha esperienza didattica come assistente in corsi di laboratorio di chimica computazionale, è stato co-supervisore di una tesi di dottorato e di una di master e supervisore di studenti Erasmus per master e bachelor.

Il giudizio complessivo sul candidato è ottimo.

Giudizio collegiale

Il Dr. Nenov Artur ha conseguito nel 2012 il titolo di Dottore di Ricerca in Chimica presso l'Università Ludwig Maximilian di Monaco con una tesi dal titolo "*Relation between structure and ultrafast photoreactivity with application to molecular switches*". A tale tesi è stato riconosciuto il premio Klaus Romer-Stiftung. Dal 2012 in poi ha continuativamente ricoperto la posizione di assegnista di ricerca presso l'Università di Bologna. La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e della chimica computazionale quantistica e tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02. È inoltre primo autore oppure corresponding author di 8 dei lavori presentati. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 48 lavori tra articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto, conference proceedings e di capitoli su libro. Il H-index della sua produzione complessiva è 14. Inoltre ha partecipato attivamente a numerosi congressi internazionali, con 8 comunicazioni orali. Ha conseguito il premio Eolo Scrocco per la Chimica Teorica. La sua esperienza didattica è suddivisa in assistenza in corsi di laboratorio di chimica computazionale e co-supervisione di tesi di dottorato, di master e di studenti Erasmus. E' da evidenziare inoltre il fatto che ha ottenuto recentemente l'abilitazione ASN per la seconda fascia nel settore 03/A2. Il giudizio complessivo sul candidato è ottimo.

Rimini, 22 Luglio 2018

PRESIDENTE Prof. Riccardo Tarroni



VALUTAZIONE COMPARATIVA PER TITOLI E DISCUSSIONE PUBBLICA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 3 LETTERA A) DELLA L. 240/10 (JUNIOR) EMANATO CON D.D. 2247 DEL 27/04/2018 E IL CUI AVVISO E' STATO PUBBLICATO SULLA G.U. - 4° SERIE SPECIALE - N. 34 DEL 27/04/2018

Verbale della II° adunanza

DICHIARAZIONE

La sottoscritta Prof. Elisabetta Venuti, membro della Commissione del reclutamento di un ricercatore con rapporto di lavoro a tempo determinato di cui all'art. 24 co. 3 lettera a (junior) della durata di tre anni, per il Settore Concorsuale 03/A2 -Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, per il Settore scientifico disciplinare CHIM/02 -Chimica Fisica, presso l'Alma Mater Studiorum – Università di Bologna, dichiara di aver partecipato in via telematica alla seconda seduta per la presa in esame collegiale dei titoli e del curriculum, delle pubblicazioni e delle eventuali lettere di referenze dei candidati, secondo l'ordine alfabetico degli stessi, e di concordare con il verbale della seduta medesima, redatto a firma del Prof. Riccardo Tarroni.

IN FEDE

Elisabetta Venuti

Bologna 22 Giugno 2018

VALUTAZIONE COMPARATIVA PER TITOLI E DISCUSSIONE PUBBLICA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 3 LETTERA A) DELLA L. 240/10 (JUNIOR) EMANATO CON D.D. 2247 DEL 27/04/2018 E IL CUI AVVISO E' STATO PUBBLICATO SULLA G.U. - 4° SERIE SPECIALE - N. 34 DEL 27/04/2018

Verbale della II° adunanza

DICHIARAZIONE

Il sottoscritto Prof. Stefano Corni, membro della Commissione del reclutamento di un ricercatore con rapporto di lavoro a tempo determinato di cui all'art. 24 co. 3 lettera a (junior) della durata di tre anni, per il Settore Concorsuale 03/A2 -Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, per il Settore scientifico disciplinare CHIM/02 -Chimica Fisica, presso l'Alma Mater Studiorum – Università di Bologna, dichiara di aver partecipato in via telematica alla seconda seduta per la presa in esame collegiale dei titoli e del curriculum, delle pubblicazioni e delle eventuali lettere di referenze dei candidati, secondo l'ordine alfabetico degli stessi, e di concordare con il verbale della seduta medesima, redatto a firma del Prof. Riccardo Tarroni.

IN FEDE



Pavia 22 Giugno 2018

VALUTAZIONE COMPARATIVA PER TITOLI E DISCUSSIONE PUBBLICA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 3 LETTERA A) DELLA L. 240/10 (JUNIOR) EMANATO CON D.D. 2247 DEL 27/04/2018 E IL CUI AVVISO E' STATO PUBBLICATO SULLA G.U. - 4° SERIE SPECIALE - N. 34 DEL 27/04/2018

Verbale della III° adunanza

Il giorno 4 luglio 2018 alle ore 9:30 presso l'aula 4, del Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari" dell'Università di Bologna, sita in viale Risorgimento,4, si riunisce in terza adunanza la Commissione giudicatrice della valutazione comparativa per titoli e discussione pubblica per il reclutamento di un ricercatore con rapporto di lavoro a tempo determinato di cui all'art. 24 co. 3 lettera a (junior) della durata di tre anni, per le esigenze del Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari" CHIMIND, con regime di impegno a tempo pieno per il Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, per il Settore scientifico disciplinare CHIM/02 - Chimica Fisica.

Sono presenti i seguenti membri della Commissione giudicatrice nominata con D.D. 2847 del 30/05/2018 :

Presidente: Prof. Riccardo Tarroni – Professore Associato presso l'Università di Bologna;
Componente: Prof. Stefano Corni – Professore Ordinario presso l'Università degli Studi di Padova
Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti – Professoressa Associata presso l'Università di Bologna

Il presidente accerta che all'esterno della sede di esame e nel corridoio di accesso all'aula siano stati affissi i cartelli concernenti l'ubicazione della stessa, accerta altresì che tutto il materiale relativo sia già stato disposto nell'aula. La Commissione richiama l'iter definito dalla stessa nel corso della I adunanza per lo svolgimento della discussione e quanto previsto dal bando di concorso in merito alla medesima. La discussione pubblica si svolgerà in lingua italiana. Verterà sull'esame dei titoli e della produzione scientifica e nella prova orale di accertamento della conoscenza della lingua inglese. Alternativamente, e a scelta del candidato, l'accertamento della lingua inglese potrà avvenire sostenendo una parte rilevante della discussione dei titoli e della produzione scientifica in inglese.

Alle ore 9:30 la Commissione procede all'appello dei candidati, in seduta pubblica e constata la presenza dei candidati:

- | | |
|----------|--------------|
| 1. CONTI | IRENE |
| 2. GUIDO | CIRO ACHILLE |
| 3. NENOV | ARTUR |

di cui viene accertata l'identità personale. Il candidato Dr. Mendola Daniele non risulta presente all'appello, pertanto è escluso dalla valutazione.

I candidati verranno esaminati in ordine alfabetico. Alle ore 9:35 Inizia la discussione in pubblica seduta

Viene chiamata la candidata **Conti Irene**. Si affrontano con la candidata i seguenti argomenti nell'ambito dei titoli e delle pubblicazioni presentate

- Superfici di energia potenziale e intersezioni coniche in reazioni fotochimiche
- Meccanismi di disattivazione degli stati eccitati
- Interazioni tra radiazione elettromagnetica e basi azotate del DNA

Viene quindi accertata la conoscenza della lingua inglese con la lettura e il commento della pagina 274 del testo prescelto.

EW RT ZL

Viene chiamato il candidato **Guido Ciro Achille**. Si affrontano con il candidato i seguenti argomenti nell'ambito dei titoli e delle pubblicazioni presentate

Proprietà elettroniche di molecole isolate e in soluzione
 State specific corrections per la descrizione dell'interazione tra stati eccitati e environment
 Applicazioni dei metodi sviluppati a transizioni a trasferimento di carica in sistemi biologici

Viene quindi accertata la conoscenza della lingua inglese con la lettura e il commento della pagina 143 del testo prescelto.

Viene chiamato il candidato **Nenov Artur**. Il candidato richiede che l'accertamento della conoscenza della lingua inglese avvenga sostenendo una parte rilevante della discussione dei titoli e della produzione scientifica in inglese. Si affrontano con il candidato i seguenti argomenti nell'ambito dei titoli e delle pubblicazioni presentate

Descrizione quantomeccanica di interruttori molecolari
 Sviluppo di interfacce tra software QM e MM (COBRAMM)
 Simulation of 2D electronic spectra of model systems, azobenzene, and peptides

Al termine della discussione i candidati lasciano l'aula e la Commissione passa all'attribuzione dei punteggi ai titoli e alle pubblicazioni secondo i criteri stabiliti nella seduta preliminare, seguendo lo stesso ordine alfabetico delle discussioni

Candidata Dr.ssa **Conti Irene**

Vengono attribuiti per i titoli complessivi punti 43,5/100, calcolati secondo la seguente tabella

Titoli	Punti
Dottorato di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'estero; max. punti 16	16
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero; max. punti 6	4,5
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; max. punti 16	16
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi; max. punti 6	6
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; max. punti 1	1
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca max. punti 4	0

Vengono altresì attribuiti alle pubblicazioni complessivi punti 45/100, calcolati secondo la seguente tabella. Nella tabella, la numerazione delle pubblicazioni corrisponde a quella dell'elenco delle pubblicazioni di cui all' Allegato 3.

N. pubblicazione	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza (max. punti 2)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale e diffusione: (max punti 0.5)	Primo autore o <i>corresponding author</i> (max punti 0.5)	congruenza SSD CHIM/02 (fattore max 1)	Punteggio Totale assegnato
1	2	0.5	0.5	1	3
2	2	0.5	0.5	1	3
3	2	0.5		1	2,5
4	2	0.5		1	2,5
5	2	0.5		1	2,5
6	2	0.5	0.5	1	3
7	2	0.5	0.5	1	3
8	2	0.5	0.5	1	3
9	2	0.5	0.5	1	3
10	2	0.5		1	2,5

EW RS A

11	2	0.5	0.5	1	3
12	2	0.5	0.5	1	3
Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza della tesi di dottorato, qualora presentata come pubblicazione (max. punti 3.0)					0
Numero totale di citazioni per le pubblicazioni presentate (max. 3 punti)					2
Indice di Hirsch delle pubblicazioni presentate (max. 3 punti)					3
Consistenza complessiva, intensità e la continuità temporale della produzione (max. punti 8)					6

Prova di conoscenza della lingua inglese: giudizio sintetico BUONO

La commissione procede quindi a esprimere il giudizio collegiale sul candidato

La candidata Dott.ssa Conti Irene ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Bologna nel 2008. Ha ricoperto dal 2008 al 2017 la posizione di assegnista di ricerca presso l'Università di Bologna. In tale periodo ha fruito di tre estesi congedi per maternità, che tuttavia non hanno influito in maniera significativa sulla sua maturazione scientifica. La sua attività di ricerca si colloca interamente nel campo della chimica computazionale quantistica. Tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 22 articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto. E' prima autrice o corresponding author di 8 dei lavori presentati, di cui 4 a primo nome su riviste ad altissimo impact factor, quali JACS. La commissione dopo attenta e dettagliata valutazione dei titoli, del curriculum e delle pubblicazioni presentate, nonché della produzione scientifica complessiva, ritiene che la Dott.ssa Conti Irene abbia una formazione e una maturità scientifica ottime, come chiaramente emerso nel corso della discussione pubblica, dove ha dimostrato notevoli capacità espositive e padronanza della materia.

Candidato Dr. **Guido Ciro Achille**.

Vengono attribuiti per i titoli complessivi punti 41,5/100, calcolati secondo la seguente tabella

Titoli	Punti
Dottorato di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'estero; max. punti 16	16
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero; max. punti 6	1.5
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; max. punti 16	16
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi; max. punti 6	6
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; max. punti 2	2
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca max. punti 4	0

Vengono altresì attribuiti alle pubblicazioni complessivi punti 46/100, calcolati secondo la seguente tabella. Nella tabella, la numerazione delle pubblicazioni corrisponde a quella dell'elenco delle pubblicazioni di cui all' Allegato 3.

N. pubblicazione	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza (max. punti 2)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale e diffusione: (max punti 0.5)	Primo autore o corresponding author (max punti 0.5)	congruenza SSD CHIM/02 (fattore max 1)	
1	2	0,5		1	2,5
2	2	0,5		1	2,5
3	2	0,5		1	2,5
4	2	0,5	0,5	1	3
5	2	0,5	0,5	1	3
6	2	0,5	0,5	1	3

Fel RT 26

7	2	0,5	0,5	1	3
8	2	0,5	0,5	1	3
9	2	0,5	0,5	1	3
10	2	0,5	0,5	1	3
11	2	0,5		1	2,5
12	2	0,5	0,5	1	3
Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza della tesi di dottorato, qualora presentata come pubblicazione (max. punti 3.0)					0
Numero totale di citazioni per le pubblicazioni presentate (max. 3 punti)					3
Indice di Hirsch delle pubblicazioni presentate (max. 3 punti)					3
Consistenza complessiva, intensità e la continuità temporale della produzione (max. punti 8)					6

Prova di conoscenza della lingua inglese: giudizio sintetico BUONO

La commissione procede quindi a esprimere il giudizio collegiale sul candidato

Il candidato Dr. Guido Ciro Achille ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca nel 2011 presso la Scuola Normale Superiore di Pisa. Ha svolto e sta svolgendo continuata attività di ricerca post-dottorato presso qualificati laboratori all'estero (École Polytechnique Fédérale di Losanna (CH), CNRS-Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation des Solides (FR), CEISAM Università di Nantes (FR)). Inoltre il candidato ha conseguito in Francia l'abilitazione al ruolo di Maître de Conférence per i quadrienni 2014-2018 e 2018-2022. Nel periodo 07/2014 – 07/2016 ha fruito di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale di Pisa (progetto ERC EnLight). La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e della chimica computazionale quantistica e tutti i lavori presentati sono interamente congrui al SSD CHIM02. La produzione complessiva consta di 26 articoli su riviste ISI di collocazione editoriale molto buona e di un capitolo di libro. E' primo autore o corresponding author di 8 dei lavori presentati. Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono. Attiva e di rilievo la sua partecipazione a congressi in ambito internazionale. Dopo attenta e dettagliata valutazione dei titoli, del curriculum, delle pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, la Commissione ritiene che il Dott. Guido abbia una personalità scientifica matura nelle tematiche affrontate, emersa nel corso della discussione pubblica. Il candidato ha infatti esposto chiaramente le sue linee di ricerca e ha risposto in modo soddisfacente alle osservazioni della Commissione.

Candidato Dr. **Nenov Artur**

Vengono attribuiti per i titoli complessivi punti 48/100, calcolati secondo la seguente tabella

Titoli	Punti
Dottorato di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'estero; max. punti 16	16
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero; max. punti 6	4
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; max. punti 16	16
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi; max. punti 6	6
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; max. punti 2	2
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca max. punti 4	4

Vengono altresì attribuiti alle pubblicazioni complessivi punti 48/100, calcolati secondo la seguente tabella. Nella tabella, la numerazione delle pubblicazioni corrisponde a quella dell'elenco delle pubblicazioni di cui all' Allegato 3.

N. pubblicazione	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza (max. punti 2)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale e diffusione: (max punti 0.5)	Primo autore o <i>corresponding author</i> (max punti 0.5)	congruenza SSD CHIM/02 (fattore max 1)	Totale

EV RT A

1	2	0,5		1	2,5
2	2	0,5	0,5	1	3
3	2	0,5	0,5	1	3
4	2	0,5	0,5	1	3
5	2	0,5	0,5	1	3
6	2	0,5	0,5	1	3
7	2	0,5	0,5	1	3
8	2	0,5		1	2,5
9	2	0,5		1	2,5
10	2	0,5	0,5	1	3
11	2	0,5	0,5	1	3
12	2	0,5		1	2,5
Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza della tesi di dottorato, qualora presentata come pubblicazione (max. punti 3.0)					0
Numero totale di citazioni per le pubblicazioni presentate (max. 3 punti)					3
Indice di Hirsch delle pubblicazioni presentate (max. 3 punti)					3
Consistenza complessiva, intensità e la continuità temporale della produzione (max. punti 8)					8

Prova di conoscenza della lingua inglese: giudizio sintetico OTTIMO
 La commissione procede quindi a esprimere il giudizio collegiale sul candidato

Il Dr. Nenov Artur ha conseguito nel 2012 il titolo di Dottore di Ricerca in Chimica presso l'Università Ludwig Maximilian di Monaco. Dal 2012 in poi ha continuativamente ricoperto la posizione di assegnista di ricerca presso l'Università di Bologna. Ha ottenuto recentemente l'abilitazione ASN per la seconda fascia nel settore 03/A2. La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e della chimica computazionale quantistica e tutti i lavori presentati sono congrui al SSD CHIM02. È inoltre primo autore oppure corresponding author di 8 dei lavori presentati. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 48 lavori tra articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto, conference proceedings e di capitoli su libro, con un H-index totale di 14. Inoltre ha partecipato attivamente a numerosi congressi internazionali, con 8 comunicazioni orali. Ha conseguito il premio Dr. Klaus Romer-Stiftung per la tesi di dottorato e il premio Eolo Scrocco per la Chimica Teorica.

Il Dr. Nenov presenta un brillante curriculum che evidenzia la sua attività nell'ambito della modellazione di sistemi complessi, di processi fotochimici e di dinamiche di stati eccitati. Il suo approccio è squisitamente computazionale, ma se ne evidenzia la continua ricerca del confronto con dati sperimentali derivati da tecniche spettroscopiche avanzate, come chiaramente emerso nella discussione pubblica. L'attività complessiva è brillante nelle metodologie ed eccellente dei risultati conseguiti. L'intera produzione scientifica è molto abbondante e di ottimo livello nel contesto internazionale di riferimento. Dopo attenta e dettagliata valutazione dei titoli, del curriculum, delle pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, la Commissione ritiene che nel complesso è possibile individuare nel Dr. Nenov una personalità scientifica originale e molto matura, in grado di svolgere in piena autonomia progetti di ricerca avanzata

Al termine della attribuzione dei punteggi ai titoli e alle pubblicazioni, la Commissione procede a riesaminare i giudizi espressi, i punteggi attribuiti a ciascun titolo, alle singole pubblicazioni e alla valutazione della conoscenza della lingua inglese. Dopo attento esame, redige la seguente graduatoria di merito dei candidati idonei.

1. NENOV	ARTUR	Punti 96/100
2. CONTI	IRENE	Punti 88,5/100
3. GUIDO	CIRO ACHILLE	Punti 87,5/100

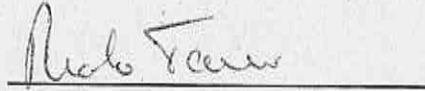
EV RT A

Il verbale originale, letto e controfirmato dai Commissari, la documentazione dei candidati e il materiale d'uso del concorso sono resi al Responsabile del procedimento concorsuale presso l'Ufficio Ricercatori a tempo determinato per la successiva approvazione degli atti.

Alle ore 14:40 la seduta viene tolta

Bologna, 4 Luglio 2018

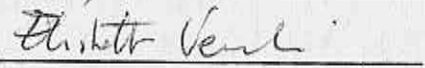
PRESIDENTE Prof. Riccardo Tarroni



COMPONENTE Prof. Stefano Corni



SEGRETARIO Prof.ssa Elisabetta Venuti



Allegato 3)

PUBBLICAZIONI DOTT.SSA Conti Irene

1	Multiple Electronic and Structural Factors Control Cyclobutane Pyrimidine Dimer and 6–4 Thymine–Thymine Photodimerization in a DNA Duplex	I. Conti, L. Martinez-Fernandez, L. Esposito, S. Hofinger, A. Nenov, M. Garavelli, R. Improta	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL Volume: 23 Issue: 60 Pages: 15177-15188 DOI: 10.1002/chem.201703237 Published: OCT 26 2017
2	Cyclohexenylphenyldiazene: A Simple Surrogate of the Azobenzene Photochromic Unit	Irene Conti, Filippo Marchioni, Alberto Credi, Giorgio Orlandi, Goffredo Rosini, Marco Garavelli	JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 129 Issue: 11 Pages: 3198-3210 DOI: 10.1021/ja0668466 Published: MAR 21 2007
3	Probing deactivation pathways of DNA nucleobases by two-dimensional electronic spectroscopy: first principles simulations	A. Nenov, J. Segarra-Martí, A. Giussani, I. Conti, I. Rivalta, E. Dumont, V. K. Jaiswal, et al	FARADAY DISCUSSIONS Volume: 177 Pages: 345-362 DOI: 10.1039/c4fd00175c Published: 2015
4	Photoinduced formation mechanism of the thymine–thymine (6–4) adduct in DNA; a QM(CASPT2//CASSCF):MM(AMBER) study	Angelo Giussani, Irene Conti, Artur Nenov, Marco Garavelli	FARADAY DISCUSSIONS Volume: 207 Pages: 375-387 DOI: 10.1039/c7fd00202e Published: APR 1 2018
5	Deciphering the photochemical mechanisms describing the UV-induced processes occurring in solvated guanine monophosphate	S. F. Altavilla, J. Segarra-Martí, A. Nenov, I. Conti, I. Rivalta, M. Garavelli	FRONTIERS IN CHEMISTRY Volume: 3 Article Number: 29 DOI: 10.3389/fchem.2015.00029 Published: APR 20 2015
6	The Different Photoisomerization Efficiency of Azobenzene in the Lowest n* and * Singlets: The Role of a Phantom State	Irene Conti, Marco Garavelli, Giorgio Orlandi	JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 130 Issue: 15 Pages: 5216-5230 DOI: 10.1021/ja710275e Published: APR 16 2008
7	Deciphering Low Energy Deactivation Channels in Adenine	Irene Conti, Marco Garavelli, Giorgio Orlandi	JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 131 Issue: 44 Pages: 16108-16118 DOI: 10.1021/ja902311y Published: NOV 11 2009
8	Revealing Excited State Interactions by Quantum-Chemical Modeling of Vibronic Activities: The R2PI Spectrum of Adenine	Irene Conti, Eugenio Di Donato,	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 113 Issue: 52 Pages: 15265-15275 DOI:

FV RS A

		Fabrizio Negri, Giorgio Orlandi	10.1021/jp905795n Published: DEC 31 2009
9	Evolution of the Excitonic State of DNA Stacked Thymines: Intrabase π π^* \rightarrow S-O Decay Paths Account for Ultrafast (Subpicosecond) and Longer (>100 ps) Deactivations	Irene Conti, Marco Garavelli	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS Volume: 9 Issue: 9 Pages: 2373-2379 DOI: 10.1021/acs.jpcllett.8b00698 Published: MAY 3 2018
10	UV-Light-Induced Vibrational Coherences: The Key to Understand Kasha Rule Violation in trans-Azobenzene	A. Nenov, R. Borrego-Varillas, A. Oriana, L. Ganzer, F. Segatta, I. Conti, J. Segarra-Marti, et al.	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS Volume: 9 Issue: 7 Pages: 1534-1541 DOI: 10.1021/acs.jpcllett.8b00152 Published: APR 5 2018
11	Adenine deactivation in DNA resolved at the CASPT2//CASSCF/AMBER level	Irene Conti, Piero Altoè, Marco Stenta, Marco Garavelli, Giorgio Orlandi	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS Volume: 12 Issue: 19 Pages: 5016-5023 DOI: 10.1039/b926608a Published: 2010,
12	Excited state evolution of DNA stacked adenines resolved at the CASPT2//CASSCF/Amber level: from the bright to the excimer state and back	I. Conti, A. Nenov, S. Hofinger, S. F. Altavilla, I. Rivalta, E. Dumont, G. Orlandi, M. Garavelli	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS Volume: 17 Issue: 11 Pages: 7291-7302 DOI: 10.1039/c4cp05546b Published: 2015

PUBBLICAZIONI Dr. Guido Ciro Achille

1	The role of magnetic-electric coupling in the exciton-coupled ECD spectra. The case of bis-phenanthrenes	S. Jurinovich, C. A. Guido, T. Bruhn, G. Pescitelli and B. Mennucci	CHEMICAL COMMUNICATIONS Volume: 51 Issue: 52 Pages: 10498-10501 DOI: 10.1039/c5cc03167b Published: 2015
2	Practical computation of electronic excitation in solution: vertical excitation model	A. V. Marenich, C. J. Cramer, D. G. Truhlar, C. A. Guido, B. Mennucci, G. Scalmani and M. J. Frisch	CHEMICAL SCIENCE Volume: 2 Issue: 11 Pages: 2143-2161 DOI: 10.1039/c1sc00313e Published: 2011
3	The Bethe Salpeter formalism with polarisable continuum embedding: reconciling linear response and state specific features	Ivan Duchemin, Ciro A. Guido, Denis Jacquemin and Xavier Blase	CHEMICAL SCIENCE Volume: 9 Issue: 19 Pages: 4430-4443 DOI: 10.1039/c8sc00529j Published: MAY 21 2018

EU RF H

4	Communication: One Third: a new recipe for the PBE0 paradigm	C. A. Guido, E. Brémond, C. Adamo and P. Cortona	JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 138 Issue: 2 Article Number: 021104 DOI: 10.1063/1.4775591 Published: JAN 14 2013
5	Excited State Gradients for State-Specific Continuum Solvation Models: the Vertical Excitation Model within a Lagrangian TDDFT formulation	C. A. Guido, G. Scalmani, B. Mennucci and D. Jacquemin	JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 146 Issue: 20 Article Number: 204106 DOI: 10.1063/1.4983696 Published: MAY 28 2017
6	The Fate of a Zwitterion in Water from Ab-Initio Molecular Dynamics: Monoethanolamine (MEA)-CO ₂	C. A. Guido, F. Pietrucci, G. A. Gallet and W. Andreoni	JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 9 Issue: 1 Pages: 28-32 DOI: 10.1021/ct301071b Published: JAN 2013
7	Benchmarking TD-DFT for excited state geometries of organic molecules in gas-phase and in solution	C. A. Guido, S. Knecht, J. Kongsted and B. Mennucci	JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 9 Issue: 5 Pages: 2209-2220 DOI: 10.1021/ct400021c Published: MAY 2013
8	On the metric of charge transfer molecular excitations: a simple chemical descriptor	C. A. Guido, R. Cortona, B. Mennucci and C. Adamo	JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 9 Issue: 7 Pages: 3118-3126 DOI: 10.1021/ct400337e Published: JUL 2013
9	Electronic Excitations in Solution: Interplay between State Specific Approaches and a TD-DFT Description	C. A. Guido, D. Jacquemin, C. Adamo and B. Mennucci	JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 11 Issue: 12 Pages: 5782-5790 DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00679 Published: DE
10	Excited State Dipole Moments in Solution: Comparison between State-Specific and Linear-Response TD-DFT Values	Ciro A. Guido, Benedetta Mennucci, Giovanni Scalmani and Denis Jacquemin	JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 14 Issue: 3 Pages: 1544-1553 DOI: 10.1021/acs.jctc.7b01230 Published: MAR 2018
11	The Control of Coherences and Optical Responses of Pigment-Protein Complexes by Plasmonic Nanoantennae..	S. Caprasecca, C. A. Guido, and B. Mennucci	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS Volume: 7 Issue: 12 Pages: 2189-2196 DOI: 10.1021/acs.jpcllett.6b00828 Published: JUN 16 2016
12	Planar vs. twisted intramolecular charge transfer mechanism in Nile Red: new hints from theory	C. A. Guido, B. Mennucci, D. Jacquemin, and C. Adamo	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS Volume: 12 Issue: 28 Pages: 8016-8023 DOI: 10.1039/b927489h Published: 2010

FW 15 H

PUBBLICAZIONI Dr. Mendola Daniele

1	Aza[6]helicene Platinum Complexes: Chirality Control of cis-trans Isomerism	Mendola D., Saleh N., Vanthuyn N., Roussel C., Toupet L., Mele A., Crassous J., Castiglione F.	ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION Volume: 53 Issue: 23 Pages: 5786-5790 DOI: 10.1002/anie.201401004 Published: JUN 2014
2	A Combined Experimental and Theoretical Study on the Stereodynamics of Monoaza[5]helicenes: Solvent-Induced Increase of the Enantiomerization Barrier in 1-Aza-[5]helicene	Caronna T., Mele A., Famulari A., Mendola D., Fontana F., Juza M., Kamuf M., Zawatzky K., Trapp O.	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL Volume: 21 Issue: 40 Pages: 13919-13924 DOI: 10.1002/chem.201502288 Published: SEP 28 2015
3	Chiroptical Phenomena in Reverse Micelles: the case of (1R,2S)-dodecyl (2-hydroxy-1-methyl-2-phenylethyl)-dimethylammoniumbromide (DMEB)	Abbate S., Passarello M., Lebon F., Longhi G., Ruggirello A. M., Turco Liveri V., Viani F., Castiglione F., Mendola D., Mele A.	CHIRALITY Volume: 26 Issue: 9 Special Issue: SI Pages: 532-538 DOI: 10.1002/chir.22309 Published: SEP 2014
4	Synthesis and Structural Properties of Aza[n]helicene Platinum Complexes: Control of Cis and Trans Stereochemistry	Mendola D., Saleh N., Hellou N., Vanthuyn N., Roussel C., Toupet L., Castiglione F., Melone F., Caronna T., Fontana F., Martí-Rujas J., Parisini E., Malpezzi L., Mele A., Crassous J.	INORGANIC CHEMISTRY Volume: 55 Issue: 5 Pages: 2009-2017 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b02276 Published: MAR 7 2016
5	Platinum(II) complexes containing unsaturated ligands. Nucleophilic substitution versus nucleophilic attack to ligand: a stereochemistry driven outcome	Belli Dell'Amico D., Broglia C., Labella L., Marchetti F., Mendola D., Samaritani S.	ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION Volume: 53 Issue: 23 Pages: 5786-5790 DOI: 10.1002/anie.201401004 Published: JUN 2014
6	Pyrazolium- versus Imidazolium-Based Ionic Liquids: Structure, Dynamics and Physicochemical Properties	Chiappe C., Sanzone A., Mendola D., Castiglione F., Famulari A., Raos G., Mele A.	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B Volume: 117 Issue: 2 Pages: 668-676 DOI: 10.1021/jp3107793 Published: JAN 17 2013
7	Helical Sense-Responsive and Substituent-Sensitive Features in Vibrational and Electronic Circular Dichroism, in Circularly Polarized Luminescence, and in	Abbate S., Longhi G., Lebon F., Castiglioni E., Superchi S., Pisani L., Fontana F., Torricelli	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C Volume: 118 Issue: 3 Pages: 1682-1695 DOI: 10.1021/jp4105695 Published: JAN 23 2014

EV RS K

	Raman Spectra of Some Simple Optically Active Hexahelicenes	F., Caronna T., Villani C., Sabia R., Tommasini M., Lucotti A., Mendola D., Mele A., Lightner D.	
8	Quantum Mechanics Calculations, Basicity and Crystal Structure: The Route to Transition Metal Complexes of Azahelicenes	Caronna T., Castiglione F., Famulari A., Fontana F., Malpezzi L., Mele A., Mendola D., Natali Sora I.	MOLECULES Volume: 17 Issue: 1 Pages: 463-479 DOI: 10.3390/molecules17010463 Published : JAN 2012

PUBBLICAZIONI Dr. Nenov Artur

1	MOLCAS 8: New Capabilities for Multiconfigurational Quantum Chemical Calculations across the Periodic Table	F. Aquilante et al.	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY Volume: 37 Issue: Pages: 506–541 DOI: DOI: 10.1002/jcc.24221 Published: 2016
2	On the Simulation of Two-dimensional Electronic Spectroscopy of Indole-containing Peptides	A. Giussani, J. Marcheselli, S. Mukamel, M. Garavelli and A. Nenov	PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY Volume: 93 Issue: Pages: 1368-1380 DOI: 10.1111/php.12770 Published: 2017
3	Impacts of hydroxylation on the photophysics of Chalcones: insights into the relation between the chemical composition and the electronic structure	D. A. Kalchevski, V. Petrov, A. Tadjer and A. Nenov	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS Volume: 20 Issue: Pages: 8924–8934 DOI: 10.1039/c8cp00602d Published: 2018
4	Disentangling Peptide Configurations via Two-Dimensional Electronic Spectroscopy: Ab Initio Simulations Beyond the Frenkel Exciton Hamiltonian	A. Nenov, I. Rivalta, G. Cerullo, S. Mukamel, and M. Garavelli	THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS Volume: 4 Issue: Pages: 767–771 DOI: 10.1021/jz5002314 Published: 2014
5	Two-Dimensional Electronic Spectroscopy of Benzene, Phenol, and Their Dimer: An Efficient First-Principles Simulation Protocol Two-Dimensional ... JCTC 2015, 11, 3755–3771	A. Nenov, S. Mukamel, M. Garavelli, and I. Rivalta	JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 11 Issue: Pages: 3755–3771 DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00443 Published: 2015
6	UV-Light-Induced Vibrational Coherences: The Key to Understand Kasha Rule Violation intrans-Azobenzene	A. Nenov et al.	THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS Volume: 9 Issue: Pages: 1534–1541 DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b00152 Published: 2018

W R 20

7	Geometrical and substituent effects in conical intersections: Linking chemical structure and photoreactivity in polyenes	A. Nenov, and R. de Vivie-Riedle	JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 135 Issue: Pages: 034304-1 - 11 DOI: 10.1063/1.3608924 Published: 2011
8	Resolving Ultrafast Photoinduced Deactivations in Water-Solvated Pyrimidine Nucleosides	A. J. Pepino, J. Segarra-Martí, A. Nenov, R. Improta, and M. Garavelli	THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS Volume: 8 Issue: Pages: 1777-1783 DOI: 10.1021/acs.jpcllett.7b00316 Published: 2017
9	Ab Initio Simulations of Two-Dimensional Electronic Spectra: The SOS//QM/MM Approach	I. Rivalta, A. Nenov, G. Cerullo, S. Mukamel, and M. Garavelli	INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY Volume: 114 Issue: Pages: 85-93 DOI: 10.1002/qua.24511 Published: 2014
10	Towards Accurate Simulations of Two-Dimensional Electronic Spectroscopy	J. Segarra-Martí, S. Mukamel, M. Garavelli, A. Nenov and I. Rivalta	Volume: Issue: Pages: DOI: Published:
11	Photoelectrochromism in the Retinal Protonated SchiffBase Chromophore: Photoisomerization Speed and Selectivity under a Homogeneous Electric Field at Different Operational Regimes	M. M. T. El-Tahawy, A. Nenov, and M. Garavelli	JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 12 Issue: Pages: 4460-4475 DOI: 10.1021/acs.jctc.6b00558 Published: 2016
12	On the Relationship Between Excited State Lifetime and Isomerization Quantum Yield in Animal Rhodopsins: Beyond the One-Dimensional Landau-Zener Model	El-Tahawy, M.; Nenov, A.; Olivucci, M.; Garavelli, M;	In corso di pubblicazione su JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS LETTERS, MANUSCRIPT ID: jz-2018-01062b.R1

Bologna, 4 Luglio 2018

PRESIDENTE Prof. Riccardo Tarroni

COMPONENTE Prof. Stefano Corni

SEGRETARIO Prof.ssa Elisabetta Venuti

