

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 B) DELLA L. 240/10 (SENIOR) EMANATO CON D.D. 4452 DEL 30/05/2019 E IL CUI AVVISO E' STATO PUBBLICATO SULLA G.U. - 4° serie speciale n. 43 del 31/05/2019

Verbale della II° adunanza

Il giorno 4 settembre, alle ore 10,30 presso un locale del Dipartimento di Chimica "G. Ciamician dell'Università di Bologna sita in Via Selmi 2 (Bologna), 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 B 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 presentii seguenti membri della Commissione giudicatrice nominata con D.D. n. 4452 del 30/05/2019

Presidente: **Prof. Francesco Zerbetto** – Professore Ordinario presso l'Università di Bologna;
Componente: **Prof. Mauro Stener** – Professore Ordinario presso l'Università degli Studi di Trieste;
Segretario: **Prof.ssa Elisabetta Venutii** – Professoressa Associata presso l'Università di Bologna.

L'adunanza si svolge in presenza di tutti i commissari, diversamente da quanto dichiarato nel verbale della prima adunanza in data 23 Luglio 2019, quando si prevedeva una seduta telematica.

La procedura di valutazione è stata bandita con Decreto Dirigenziale n. 4452 del 30/05/2019. L'avviso della procedura è stato pubblicato sulla G.U. – 4° serie speciale n. 43 del 31/05/2019, sul portale d'Ateneo, su quello del Miur e su quello europeo della ricerca.

L'organizzazione della selezione e tutto il materiale necessario sono stati predisposti dai competenti uffici amministrativi dell'Università degli Studi di Bologna.

Il Presidente dichiara aperta la seduta e dà lettura del bando di selezione e degli atti normativi e del Regolamento d'Ateneo per i Ricercatori a tempo determinato che disciplinano la selezione stessa.

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 23 Luglio 2019, il cui verbale è stato pubblicato sul portale d'ateneo.

La Commissione procede quindi all'esame delle singole domande pervenute, inviate elettronicamente dall'ufficio ricercatori dopo la pubblicazione del verbale della prima seduta, accertando preliminarmente 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, né tra i membri della Commissione stessa. La Commissione ai sensi dell'art. 11, 1° comma, del D.P.R. n. 487/1994, considerato il numero dei concorrenti, stabilisce che la procedura concorsuale dovrà terminare entro il 1 Ottobre 2019. Tale termine dovrà essere comunicato ai candidati al momento dell'effettuazione della discussione pubblica.

La Commissione stabilisce inoltre che i candidati verranno esaminati in ordine alfabetico e che la durata della discussione è stabilita in 30 minuti per ciascun candidato.

MS M. EV

La Commissione procede quindi alla presa in esame, secondo l'ordine alfabetico dei candidati, dei titoli e del curriculum, delle pubblicazioni e delle eventuali lettere di referenze allegati alla domanda di partecipazione.

Vengono esaminati pertanto, i titoli e i curriculum, le pubblicazioni e le lettere di referenze del candidato Dott. Lorenzo Gontrani e di seguito quelli degli altri candidati in ordine alfabetico come di seguito riportato:

Dott. Agostino Migliore

Dott. Artur Nenov

Dott. Sergio Rampino

Ciascun Commissario formula il proprio giudizio individuale in merito al candidato e la Commissione quello collegiale. I giudizi dei singoli commissari e quello collegiale sono allegati al presente verbale quale sua parte integrante (allegato 1).

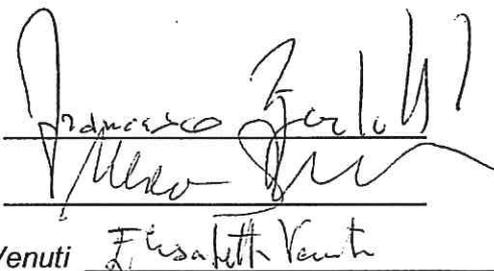
La Commissione si aggiorna per il giorno 16 Settembre 2019 alle ore 10:30 presso l' Aula 4 del Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari" sito in Viale Risorgimento, 4 – Bologna
Alle ore 13:40 la seduta viene tolta.

Bologna, 4 Settembre 2019

PRESIDENTE Prof. *Francesco Zerbetto*

COMPONENTE Prof. *Mauro Stener*

COMPONENTE/SEGRETARIO Prof.ssa *Elisabetta Venuti*



Handwritten signatures of Francesco Zerbetto, Mauro Stener, and Elisabetta Venuti over horizontal lines.



Handwritten initials AA.

ALLEGATO 1)

Giudizio su titoli, pubblicazioni ed eventuali lettere di referenze

Candidato: Dott. Gontrani Lorenzo

Nato a

Quadro del candidato come emerge dall'esame collettivo della commissione del curriculum e dei titoli presentati

Il Dott. Gontrani Lorenzo ha conseguito la Laurea in Chimica con lode presso l'Università "La Sapienza" nel 1998, e il Dottorato di Ricerca in Scienza Chimiche presso l'Università di Pisa nel 2002, con tesi dal titolo: "*Studio delle proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico con metodi teorico-computazionali. Esempi di applicazioni di metodi teorici di vario tipo e sofisticazione allo studio di sistemi biologici di differente complessità*". Assegnista di ricerca presso l'Università di Cagliari dal 16 novembre 2007 al 15 novembre 2008; presso Università "La Sapienza" dal 1 luglio 2009 al 30 giugno 2010, e dal 2014 al 2018; presso Università di Bologna da aprile 2018 ad aprile 2019. Co.co.co presso il CNR da maggio 2011 a maggio 2014. Borsista presso CASPUR (Roma) dal 1 giugno 2006 al 1 novembre 2007. In ambito non accademico: ricercatore presso la start-up C4T dal 2002 al 2006. Nel 2014 ha conseguito l'abilitazione a professore di II fascia nel settore concorsuale 03/A2.

Nel dicembre 2009 il Dott. Gontrani è stato visiting scientist al Laboratoire de Thermodynamique des Solutions et des Polymères - Université Blaise Pascal (Aubière-Clermont-Ferrand) e nel giugno del 2018 al Laboratorio QUILL, Queen's University of Belfast, (Irlanda del Nord, UK).

Il candidato documenta la partecipazione a progetti di ricerca finanziati sulla base di bandi competitivi ed è stato responsabile di progetti di assegnazione di tempo di calcolo.

La sua ricerca si sviluppa principalmente nel campo dello studio sia sperimentale che computazionale - come evidenziato nelle numerose lettere di presentazione - di liquidi ionici e di miscele liquide binarie, con utilizzo di tecniche di scattering di neutroni e raggi X, di spettroscopie vibrazionali e di metodi di simulazione di dinamica molecolare.

Il dott. Gontrani ha una produzione complessiva di 82 lavori a stampa (H index 24, fonte Scopus: 80 articoli, 2 Conference Proceeding), tutti indicizzati ISI su riviste pienamente congruenti all' SSD CHIM02 e di due capitoli di libro. E' stato Editor di un volume. E' corresponding author e/o primo autore di 13 delle 15 pubblicazioni presentate, e primo autore in 2. Presenta 15 comunicazioni orali a congressi nazionali (5) e internazionali (10), ed è stato relatore di 6 di queste.

Attività didattica in ambito universitario: moduli di 20 ore (2 CFU) in insegnamenti dell' SSD CHIM02 dall' AA 2010-2011 all'AA 2016-2017. Ha supervisionato numerose tesi triennali, magistrali e di dottorato.

Presenta sette ottime lettere di referenza.

Giudizi individuali

Presidente Prof. Francesco Zerbetto



Complessivamente il Dott. Gontrani ha svolto una attività scientifica di notevole consistenza e qualità caratterizzata da una buona collocazione editoriale con alcune punte di eccellenza. L'impegno didattico è stato pertinente al SSD CHIM02. Il cv e le pubblicazioni riflettono un ricercatore competente, maturo e più che professionale.

Il giudizio complessivo sul Dott. Gontrani è molto buono.

Commissario: Prof. Mauro Stener

L'attività scientifica del Dott. Gontrani si svolge totalmente all'interno del SSD CHIM02, di buon livello editoriale sia dal punto di vista quantitativo che qualitativo, cadendo nell'intervallo medio dei fattori di impatto. L'attività didattica risulta di buon livello ed è pertinente al SSD CHIM/02, comprendendo sia la titolarità di insegnamenti che la supervisione di studenti. Nel complesso, il suo curriculum e le sue pubblicazioni denotano il profilo di un ricercatore maturo con un notevole grado di professionalità e competenza nel settore di riferimento.

Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono.

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

La produzione scientifica del Dott. Gontrani risulta pienamente congruente all'SSD CHIM02, di ottima consistenza e buona collocazione editoriale, nella fascia media dei fattori di impatto, con 5 lavori a $IF \geq 7$. Pertinente all'SSD l'impegno didattico come titolare di moduli e di supervisione di studenti. Nel complesso, il suo curriculum e le sue pubblicazioni denotano il profilo di un ricercatore maturo con un elevato grado di professionalità e competenza nel campo dello studio di sistemi liquidi.

Il giudizio complessivo sul Dott. Gontrani è molto buono.

Giudizio collegiale

Il Dott. Gontrani ha lavorato continuativamente come post-doc o borsista in campo accademico dal 2006 al 2019 presso enti di ricerca pubblici e nel periodo 2002-2006 è stato ricercatore presso una start-up. L'attività scientifica del Dott. Gontrani Lorenzo è incentrata sullo studio di sistemi liquidi, e focalizzata sulle proprietà di liquidi ionici, con competenze sia sperimentali che computazionali. La sua produzione scientifica, tutta pertinente all'SSD di riferimento presenta buona consistenza, anche in relazione agli anni di attività, e consta di due capitoli di libro, una curatela editoriale, 82 prodotti indicizzati ISI con H index = 24 con buona collocazione editoriale. L'attività didattica comprende titolarità di corsi in CHIM02. Complessivamente, si identificano, anche dalla lettura delle numerose lettere di referenza, la maturità e la competenza che contraddistinguono il candidato nel suo ambito di ricerca.

L'analisi dei titoli, del curriculum e delle lettere di referenza permettono alla commissione di giudicare con giudizio unanime il candidato Dott. Gontrani, e pertanto :

Il giudizio collegiale sul Dott. Gontrani è molto buono.

Candidato: Dott. Agostino Migliore

Nato a .

Quadro del candidato come emerge dall'esame collettivo della commissione del curriculum e dei titoli presentati

Il Dott. Agostino Migliore ha conseguito la laurea in Fisica presso l'Università di Palermo nel 2003 e il dottorato in Fisica presso l'Università di Modena e Reggio Emilia nel 2007 con tesi dal titolo: "Theory of Electron Transfer in Biomolecular Systems". Il Dott. Migliore ha ricoperto in maniera continuata dal 2007 a giugno 2014 posizioni di post-dottorato presso: Center for Molecular Modeling of LRSM- University of Pennsylvania (USA), School of Chemistry -Tel Aviv University, (Israel), Chemistry Department - Duke University, Durham, NC (USA). Dal 2014 al presente è Assistant Research Professor, Chemistry Department, Duke University, Durham, NC, (USA). Ha ottenuto nel 2019 l'ASN alla seconda fascia nel settore 03/A2.

Il campo di ricerca del Dott. Migliore è nella chimica fisica teorica e computazionale, con riferimento a processi di trasferimento di carica, conversione di energia e trasmissione di informazione in sistemi di origine biologica e biochimica, con implicazioni in reazioni chimiche, processi redox e elettronica molecolare. Oggetto di studio sono proprietà strutturali e elettroniche di sistemi organici, proteine e DNA, nonché nano-giunzioni di organico-inorganico in dispositivi molecolari.

E' o è stato responsabile di 2 progetti competitivi e ha partecipato, contribuendo alla stesura, ad alcuni altri.

La sua produzione scientifica consta di 1 capitolo di libro, una voce enciclopedica e 28 lavori a stampa (Fonte Scopus: 28 articoli e 1 nota indicizzati ISI) con un H index complessivo di 16 e con articoli in riviste a fattore di impatto ≥ 20 . Dei 15 articoli presentati per la valutazione, è corresponding author di 10, primo autore in 7 di questi, e in altri 2 è autore singolo.

Ha al suo attivo 10 presentazioni orali (4 su invito) e 11 seminari in contesti internazionali.

Attività didattica pertinente all'SSD di riferimento, concernente contributi o moduli in corsi inter-universitari negli anni 2014-2016. Ha seguito studenti di dottorato, e a livello corrispondente a lauree magistrale e triennale.

Presenta due ottime lettere di referenza.

Giudizi Individuali

Presidente Prof. Francesco Zerbetto

Complessivamente il Dott. Migliore ha svolto una attività scientifica di notevole consistenza e qualità, caratterizzata da una buona collocazione editoriale con punte di assoluta eccellenza. L'impegno didattico è pertinente al SSD CHIM02. Il cv e le pubblicazioni riflettono un ricercatore competente, maturo e più che professionale.

Il giudizio complessivo sul Dr. Migliore è molto buono.

Commissario: Prof. Mauro Stener



L'attività di ricerca del Dott. Migliore spazia nella chimica teorica e computazionale, nello specifico per la descrizione di fenomeni di trasferimento elettronico in sistemi complessi.

La produzione, di livello quantitativo abbastanza buono, dimostra continuità temporale ed alto livello qualitativo. Le lettere di referenza sottolineano il contributo personale del dott. Migliore nei lavori prodotti.

Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

Il campo di ricerca del Dott. Migliore è nella chimica fisica teorica e computazionale, con un particolare interesse per i processi di trasferimento elettronico in sistemi complessi.

La produzione è costante nel tempo anche se non abbondantissima in considerazione degli anni di attività, nella fascia alta di IF. Si segnalano recenti eccellenze (Science, Chemical Review, Nature Nanotechnology, Accounts of Chemical research, Chem) in riviste a fattore di impatto molto alto e due articoli a singolo autore.

Le lettere di referenza presentate mettono in evidenza l'elevato valore del contributo apportato dal Dott. Migliore nell'ambito di ricerca in cui è attivo.

Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono

Giudizio collegiale

Dal 2007 al presente il Dott. Migliore ha svolto la sua attività all'estero, presso istituti di ricerca qualificati prima come Post-doc e dal 2014 come Assistant Research Professor, Chemistry Department, Duke University, Durham, NC, (USA). Durante questo periodo il candidato è stato autore di un di 1 capitolo di libro, una voce enciclopedica e 29 prodotti indicizzati ISI, con H index = 16, dimostrando una buona consistenza e continuità, con punte di eccellenza quanto a collocazione editoriale. L'intera produzione di colloca nell'ambito dell'SSD CHIM02, nel campo della chimica computazionale. La piena maturità scientifica del candidato è attestata dalle lettere di referenza che accompagnano la domanda.

L'Attività didattica è pertinente all'SSD di riferimento, concernente contributi o moduli in corsi inter-universitari negli anni 2014-2016.

L'analisi dei titoli, del curriculum e delle lettere di referenza permettono alla commissione di giudicare con giudizio unanime il candidato Dott. Migliore, e pertanto:

Il giudizio collegiale sul Dott. Migliore è molto buono.

Candidato: Dr. Nenov Artur

Nato a --

Quadro del candidato come emerge dall'esame collettivo della commissione del curriculum e dei titoli presentati



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 al 2018 ha ricoperto la posizione di assegnista di Ricerca presso l'Università di Bologna. Nel 2013 ha ricevuto il premio Dr. Klaus Romer-Stiftung per la tesi di dottorato e 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. Da Ottobre 2018 è RTDA in Chim02 presso l'Università di Bologna.

La sua attività di ricerca si colloca tutta nel campo della chimica teorica. Nei primi anni la sua attività di ricerca 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 processi fotoindotti per la comprensione dei risultati sperimentali. Ha inoltre ampiamente lavorato nello sviluppo e nell'applicazione dei software MOLCAS e COBRAMM. Dal 2018, nell'ambito del progetto "Theory and Simulation of Ultrafast Multidimensional Nonlinear X-ray Spectroscopy of Molecules" l'approccio computazionale è rivolto allo sviluppo di metodi per la simulazione ab-initio di tecniche multidimensionali che utilizzano spettroscopie veloci a raggi X.

È primo autore di 10 dei lavori presentati, e corresponding author in 6. Tutti i lavori sono congruenti al SSD CHIM02. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di articoli su riviste ISI ad alto e medio fattore di impatto (Fonte Scopus: 50 contributi, 45 articoli, 2 Conference papers, 3 Note, con indice H=17) e di un capitolo su libro. Ha un totale di 10 presentazioni orali a congressi nazionali (1) e internazionali (8) di cui una a invito. Ha esperienza didattica di supporto in corsi di laboratorio di chimica computazionale e come RTDA in didattica frontale in insegnamenti di fisica. E' o è stato -supervisore di 2 tesi di dottorato e di una di master e supervisore di studenti Erasmus per master e bachelor.

Presenta due ottime lettere di referenza.

Giudizi individuali

Presidente Prof. Francesco Zerbetto

Complessivamente il Dott. Nenov ha svolto una attività scientifica di notevole consistenza e qualità, caratterizzata da una buona collocazione editoriale con punte di eccellenza e di grande originalità. L'impegno didattico è stato pertinente al SSD CHIM02. Il cv e le pubblicazioni riflettono un ricercatore originale, competente e maturo.

Il giudizio complessivo sul candidato è ottimo

Commissario: Prof. Mauro Stener



La produzione scientifica del Dott. Nenov dimostra spiccata originalità ed indipendenza, che si distingue per innovatività e esperienza nel campo della struttura elettronica molecolare e nella descrizione di dinamiche. Le pubblicazioni sono di ottimo livello qualitativo e quantitativo.

Nel complesso, il Dr. Nenov, sia come esperienza professionale che come produzione scientifica, risulta particolarmente versato per affrontare problematiche complesse.

Il giudizio complessivo sul candidato è ottimo

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

Il curriculum del Dott. Nenov e le lettere di presentazione allegate descrivono un ricercatore estremamente originale e indipendente, con molte idee innovative e una profonda padronanza delle teorie della struttura elettronica, e delle simulazioni di processi dinamici e spettroscopici. Ottima la consistenza della produzione scientifica, il rigore metodologico, l'intensità e la continuità.

Nel complesso, il Dr. Nenov presenta percorso professionale 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.

Il giudizio complessivo sul candidato è ottimo.

Giudizio collegiale

Il Dott. Nenov presenta titoli e un numero elevato di pubblicazioni in un ambito totalmente coerente con l'SSD CHIM02. E' in grado di sviluppare gli strumenti teorici necessari per interfacciarsi agli esperimenti nel campo della dinamica di stati eccitati. La sua produzione, che consta di 50 prodotti indicizzati ISI su riviste ad alto e medio fattore di impatto (H index = 17), e di un articolo di libro, è caratterizzata da ottima continuità, originalità e intensità. I brillanti risultati ottenuti nel campo della chimica teorica e computazionale lo hanno reso meritevole di riconoscimenti quali premi i premi Dr. Klaus Romer-Stiftung e Eolo Scrocco per la Chimica Teorica. Le lettere di referenza attestano l'ottima reputazione internazionale del candidato. La sua esperienza didattica è suddivisa in corsi frontali e in assistenza in corsi di laboratorio di chimica. L'analisi dei titoli, del curriculum e delle lettere di referenza permettono alla commissione di giudicare con giudizio unanime il candidato Dott. Nenov, e pertanto:

Il giudizio collegiale sul Dott. Nenov è ottimo.

Candidato: Dott. Sergio Rampino

Nato a:

Quadro del candidato come emerge dall'esame collettivo della commissione del curriculum e dei titoli presentati

Il Dott. Sergio Rampino ha conseguito la Laurea specialistica in Scienze Chimiche con lode nel 2007 all'Università di Perugia (European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling) e presso la stessa Università il Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche con tesi dal

titolo "Workflows and data models for atom diatom quantum reactive scattering calculations on the Grid" nel 2011. Assegno di Ricerca all'Università di Perugia dal 2010 al 2011, presso il CNR (PG) dal 2013 al 2016, e alla Scuola Normale di Pisa dal 2016 al 2017. Dal 2 Ottobre 2017 al presente è RTDA in CHIM02 presso la Scuola Normale. Su progetti COST, HPC-Europa e altre collaborazioni dal 2019 al 2011 ha trascorso un totale di circa 9 mesi presso centri di calcolo/ricerca all'estero. Nel 2018 ha ottenuto l'abilitazione ASN per la seconda fascia nel settore 03/A2. Nel 2016 ha ricevuto il premio Eolo Scrocco per la Chimica Teorica ed è stato finalista Top-10 per il Premio Primo Levi.

L'attività di ricerca del candidato è nel campo della chimica teorica e computazionale. I suoi interessi si collocano nello sviluppo e nell'applicazione di metodi per lo studio a) della quantodinamica delle reazioni chimiche, a cui è legata la messa a punto del simulatore GEMS, con l'implementazione della portabilità di dati fra codici diversi; b) di strutture elettroniche relativistiche, con sviluppo di programmi (BERTHA) e l'analisi del legame chimico in elementi pesanti; c) delle proprietà del legame in chimica di coordinazione e in complessi non covalenti.

Il candidato documenta la partecipazione a numerosi progetti di ricerca competitivi nazionali e internazionali, e il coordinamento di progetti di tempo calcolo.

Il dott. Rampino ha una produzione complessiva di lavori a stampa con H index 12, tutti indicizzati ISI su riviste congruenti all' SSD CHIM02 (Fonte Scopus: 32 articoli, 9 conference papers, 1 nota), con una buona percentuale nella fascia medio alta. E' primo e corresponding author di 6 dei 15 lavori presentati per questa valutazione (di 1 è unico autore) e corresponding di altri 8. E' cofondatore e editor della rivista scientifica elettronica internazionale VIRT&L-COMM, su cui ha pubblicato 4 lavori.

Molte le partecipazioni a congressi/workshop/scuole nazionali e internazionali, e molti i seminari a invito.

L'attività didattica è congruente all'SSD di riferimento: in qualità di RTDA è titolare di due corsi dall' AA 2017/2018. E' stato supervisore di tre tesi di laurea magistrali.

Presenta due ottime lettere di referenza.

Giudizi individuali

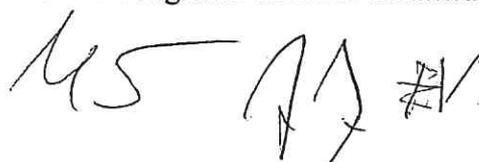
Presidente Prof. Francesco Zerbetto

Complessivamente il Dott. Rampino ha svolto una attività scientifica di ragguardevole consistenza e qualità, caratterizzata da una buona collocazione editoriale. L'attività didattica è stata pertinente al SSD CHIM02. Il cv e le pubblicazioni riflettono un ricercatore competente, maturo e professionale.

Il giudizio complessivo sul Dr. Rampino è molto buono.

Commissario: Prof. Mauro Stener

Produzione scientifica già notevole in relazione all'età del candidato, che spazia con competenza dalla dinamica delle reazioni chimiche alla struttura elettronica relativistica e all'analisi del legame chimico. Gli articoli scientifici sono tutti collocati editorialmente su riviste di ottimo livello. Numerose esperienze all'estero, in varie sedi. Intensa partecipazione a congressi. Attività didattica ampia e pertinente.



Ha dato un notevole contributo allo sviluppo di nuovi metodi di calcolo e di analisi.

Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono.

Segretario: Prof.ssa Elisabetta Venuti

L'attività scientifica del Dott. Rampino è incentrata sullo sviluppo di metodi e sul calcolo di proprietà e struttura di sistemi chimici di varia complessità. La sua produzione scientifica è significativa, incentrata su tematiche proprie dell'SSD CHIM02 e caratterizzata da originalità, rigore metodologico e continuità temporale. Di rilievo la partecipazione a progetti di ricerca sia in ambito nazionale che internazionale.

Le lettere di referenza presentano una giovane personalità scientifica in cui si sposano capacità computazionali, intuizione chimica e know-how scientifico applicati con successo alla soluzione di problemi complessi.

Il giudizio complessivo sul candidato è molto buono.

Giudizio collegiale

Il Dott. Rampino, assegnista di ricerca in modo continuato presso enti di ricerca pubblici dal 2010 al 2017, è dal 2017 RTDA presso la Scuola Normale di Pisa. L'attività di ricerca del candidato è nel campo della chimica teorica e computazionale, e la sua produzione scientifica è totalmente pertinente all'SSD CHIM02. Complessivamente la produzione consta di 42 prodotti indicizzati ISI con H index 12, con una buona percentuale nella fascia medio alta. La produzione è notevole, anche tenuto conto della giovane età del candidato, e caratterizzata da originalità, rigore metodologico e continuità temporale. Le lettere di referenza ne evidenziano il notevole contributo allo sviluppo di nuovi metodi di calcolo e di analisi.

Attività didattica di tipo frontale pertinente all'SSD CHIM02.

L'analisi dei titoli, del curriculum e delle lettere di referenza permettono alla commissione di giudicare con giudizio unanime il candidato Dott. Rampino, e pertanto:

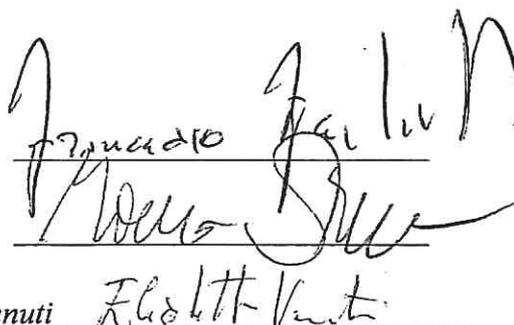
Il giudizio collegiale sul Dott. Rampino è molto buono.

Bologna, 4 Settembre 2019

PRESIDENTE Prof. *Francesco Zerbetto*

COMPONENTE Prof. *Mauro Stener*

COMPONENTE/SEGRETARIO Prof.ssa *Elisabetta Venuti*



Handwritten signatures of Francesco Zerbetto, Mauro Stener, and Elisabetta Venuti, each on a horizontal line.

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 B) DELLA L. 240/10 (SENIOR) EMANATO CON D.D. 4452 DEL 30/05/2019 E IL CUI AVVISO E' STATO PUBBLICATO SULLA G.U. - 4° serie speciale n. 43 del 31/05/2019

Verbale della III adunanza

Il giorno 16 Settembre 2019 alle ore 10:20 presso l'Aula 4 del Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari" sito in Viale Risorgimento, 4 – Bologna, si riunisce in terza adunanza la Commissione giudicatrice della valutazione comparativa per il reclutamento di un ricercatore con rapporto di lavoro a tempo determinato della durata di tre anni, per la discussione pubblica coi candidati dei titoli e delle pubblicazioni valutabili allegati alle domande di partecipazione. Sono presenti i seguenti membri della Commissione giudicatrice nominata con D.D. n. 4452 del 30/05/2019

Presidente: **Prof. Francesco Zerbetto** – Professore Ordinario presso l'Università di Bologna;
Componente: **Prof. Mauro Stener** – Professore Ordinario presso l'Università degli Studi di Trieste;
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 inglese, e verterà sull'esame dei titoli e della produzione scientifica.

Alle ore 10:30 la Commissione procede all'appello dei candidati, in seduta pubblica e constata la presenza dei candidati:

1. Dott. Gontrani Lorenzo
2. Dott. Migliore Agostino
3. Dott. Nenov Artur
4. Dott. Sergio Rampino

di cui viene accertata l'identità personale.

La Commissione, ai sensi dell'art. 11, 1° comma, del D.P.R. 487/1994, rende pubblico il termine del procedimento concorsuale e comunica che dovrà concludersi entro il 30/09/2019 (i candidati verranno esaminati in ordine alfabetico), come stabilito nella seduta preliminare.

I candidati verranno esaminati in ordine alfabetico. Alle ore 10:35 inizia la discussione in pubblica seduta

Viene chiamato il candidato Dott. **Lorenzo Gontrani**. Si affrontano con il candidato i seguenti argomenti nell'ambito dei titoli e delle pubblicazioni presentate

- Molecular Dynamics and its implementation at various levels of molecular organization
- Ionic Liquids and Eutectic systems
- Development of a new high resolution X-ray equipment

The image shows two handwritten signatures in black ink. The signature on the left is larger and more stylized, appearing to be 'MS'. The signature on the right is smaller and more compact, appearing to be 'EV'. There is also a small mark below the right signature that looks like 'ET'.

Viene chiamato il candidato Dott. **Agostino Migliore**. Si affrontano con il candidato i seguenti argomenti nell'ambito dei titoli e delle pubblicazioni presentate

- Development and application of Rabi's equation in the presence of non-orthogonal states
- Electronic Transitions in the presence of static electric fields
- Solid state molecule-graphene switches

Viene chiamato il candidato Dott. **Nenov Artur**. Si affrontano con il candidato i seguenti argomenti nell'ambito dei titoli e delle pubblicazioni presentate

- Development of QM/MM applications
- Non Linear optical spectroscopy from first principles
- New Computational tools for X-ray spectroscopy

Viene chiamato il candidato Dott. **Sergio Rampino**. Si affrontano con il candidato i seguenti argomenti nell'ambito dei titoli e delle pubblicazioni presentate

- Quantum dynamics
- Relativistic DFT approaches for electronic structures
- Chemical Bonding

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

Candidato Dott. **Lorenzo Gontrani**

Vengono attribuiti per i titoli complessivi punti **45/100**, calcolati secondo la seguente tabella

Titoli	Punti
Dottorato di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'estero; max. punti 10	10
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero; max. punti 9	8
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; max. punti 12	12
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi; max. punti 9	9
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; max. punti 6	6
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca max. punti 4	0

Vengono altresì attribuiti alle pubblicazioni complessivi punti **42,50/100**, calcolati secondo la seguente tabella. Nella tabella, la numerazione delle pubblicazioni corrisponde a quella dell'elenco delle pubblicazioni di cui all' Allegato 1 del presente verbale.

N. pubblicazione	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza (max. punti 1)	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 Tototale assegnato
1	1	0,5	0	1	1,5
2	1	0,5	0,5	1	2
3	1	0,5	0,5	1	2
4	1	0,5	0,5	1	2
5	1	0,5	0,5	1	2
6	1	0,25	0,5	1	1,75
7	1	0,5	0,5	1	2

MS

PA

EV

8	1	0,5	0,5	1	2
9	1	0,5	0,5	1	2
10	1	0,5	0,5	1	2
11	1	0,25	0,5	1	1,75
12	1	0,5	0,5	1	2
13	1	0,5	0,5	1	2
14	1	0,5	0	1	1,5
15	1	0,5	0,5	1	2
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 (databas Scopus) (max. 4 punti)					2
Indice di Hirsch delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					2
Impact factor medio dei giornali delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					2
Consistenza complessiva, intensità e la continuità temporale della produzione (max. punti 8)					8

Il punteggio complessivo ottenuto dal candidato è di punti **87,50/100**.

La Commissione procede immediatamente ad esprimere il giudizio collegiale sul candidato:

Dott. Lorenzo Gontrani – (giudizio collegiale)

Il Dott. Gondrani ha conseguito il Dottorato di ricerca nel 1998, è stato borsista presso il centro di calcolo CASPUR (Roma) dal 2006 al 2007; presso CNR dal 2011 al 2014; assegnista di ricerca presso i Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Cagliari, di Scienze della Terra e di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza" e di Chimica dell'Università di Bologna. Ha conseguito l'abilitazione a professore di II fascia nel settore concorsuale 03/A2 nel 2014.

Il Dott. Lorenzo Gontrani possiede una notevole esperienza scientifica, maturata nell'ambito di diversi gruppi di ricerca nazionali, in cui si combinano competenze di tipo sperimentale e computazionale nello studio di proprietà chimico fisiche di stato liquido. La produzione scientifica è conforme all'SSD CHIM02, con buona collocazione editoriale e ottima consistenza complessiva. Partecipante in progetti competitivi e investigatore principale in progetti per assegnazione di tempo di calcolo. L'attività didattica è coerente con quella richiesta per l'SSD di riferimento.

Nella discussione pubblica il Dott. Gontrani ha presentato con chiarezza i risultati della sua ricerca, evidenziando il suo personale contributo con professionalità.

Dopo attenta e dettagliata valutazione dei titoli, del curriculum, delle pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, la Commissione individua nel Dott. Gontrani il profilo di un ricercatore maturo e competente.

Candidato Dott. Agostino Migliore.

Vengono attribuiti per i titoli complessivi punti **42/100**, calcolati secondo la seguente tabella

Titoli	Punti
Dottorato di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'estero; max. punti 10	10
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero; max. punti 9	5
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; max. punti 12	12
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi; max. punti 9	9
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; max. punti 6	6
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca max. punti 4	0

MS

RA EV

Vengono altresì attribuiti alle pubblicazioni complessivi punti **47,5/100**, 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 1)	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	1	0,5	0,5	1	2
2	1	0,5	0,5	1	2
3	1	0,5	0,5	1	2
4	1	0,5	0,5	1	2
5	1	0,5	0,5	1	2
6	1	0,5	0,5	1	2
7	1	0,5	0,5	1	2
8	1	0,5	0	1	1,5
9	1	0,5	0,5	1	2
10	1	0,5	0,5	1	2
11	1	0,5	0,5	1	2
12	1	0,5	0,5	1	2
13	1	0,5	0,5	1	2
14	1	0,5	0,5	1	2
15	1	0,5	0,5	1	2
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 (databas Scopus) (max. 4 punti)					4
Indice di Hirsch delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					4
Impact factor medio dei giornali delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					4
Consistenza complessiva, intensità e la continuità temporale della produzione (max. punti 8)					6

Il punteggio complessivo ottenuto dal candidato è di punti **89,5/100**.

La Commissione procede immediatamente ad esprimere il giudizio collegiale sul candidato:
Dott. Agostino Migliore – (giudizio collegiale)

Il Dott. Agostino Migliore ha conseguito dottorato in Fisica nel 2007 e ha ricoperto in maniera continuativa dal 2007 a giugno 2014 posizioni di post-dottorato presso qualificati centri di ricerca stranieri (Center for Molecular Modeling of LRSM- University of Pennsylvania, School of Chemistry -Tel Aviv University, Chemistry Department - Duke University, Durham). Dal 2014 al presente è Assistant Research Professor, presso la Duke University, Durham, NC, (USA). Ha ottenuto nel 2019 l'ASN alla seconda fascia nel settore 03/A2. Nell'ambito della chimica computazionale volta alla descrizione di fenomeni di trasferimento di carica in sistemi complessi, la sua produzione si caratterizza per originalità e eccellenza di una parte della collocazione editoriale, nonché per buone consistenza e intensità. E' stato investigatore principale di progetti competitivi e ha contribuito alla stesura di progetti a cui ha partecipato. Attiva la partecipazione a congressi in ambito internazionale.

L'attività didattica è coerente con quella richiesta per l'SSD di riferimento, ma non molto estesa.

MS

PA

Dopo attenta e dettagliata valutazione dei titoli, del curriculum, delle pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, la Commissione ritiene che il Dott. Agostino Migliore abbia una personalità scientifica originale e matura nelle tematiche affrontate, emersa nel corso della discussione pubblica, dove il candidato ha esposto in maniera esauriente e chiara gli argomenti relativi alla sua ricerca, dando modo alla commissione di apprezzarne la competenza.

Candidato Dott. **Artur Nenov**.

Vengono attribuiti per i titoli complessivi punti **49/100**, calcolati secondo la seguente tabella

Titoli	Punti
Dottorato di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'estero; max. punti 10	10
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero; max. punti 9	9
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; max. punti 12	11
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi; max. punti 9	9
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; max. punti 6	6
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca max. punti 4	4

Vengono altresì attribuiti alle pubblicazioni complessivi punti **47,5/100**, 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 1)	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	1	0,5	0,5	1	2
2	1	0,5	0,5	1	2
3	1	0,5	0,5	1	2
4	1	0,5	0,5	1	2
5	1	0,5	0,5	1	2
6	1	0,5	0	1	1,5
7	1	0,5	0,5	1	2
8	1	0,5	0,5	1	2
9	1	0,5	0,5	1	2
10	1	0,5	0,5	1	2
11	1	0,5	0,5	1	2
12	1	0,5	0,5	1	2
13	1	0,5	0,5	1	2
14	1	0,5	0,5	1	2
15	1	0,5	0,5	1	2
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 (database Scopus) (max. 4 punti)					4
Indice di Hirsch delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					4
Impact factor medio dei giornali delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					2
Consistenza complessiva, intensità e la continuità temporale della produzione (max. punti 8)					8

Il punteggio complessivo ottenuto dal candidato è di punti **96,5/100**.

La Commissione procede immediatamente ad esprimere il giudizio collegiale sul candidato:
Dott. Artur Nenov – (giudizio collegiale)

Il Dott. Artur Nenov ha conseguito nel 2012 il titolo di Dottore di ricerca presso l'Università Ludwig Maximilian di Monaco. Dal 2012 in poi ha continuativamente ricoperto la posizione di assegnista presso l'Università di Bologna, dove al presente è RTDA nel settore CHIM02. Nel 2018 ha ottenuto l'abilitazione ASN per la II fascia nel settore 03/A2. Ha conseguito il premio Dr. Klaus Romer-Stiftung per la miglior tesi di dottorato (2013) e il premio Eolo Scrocco per la Chimica Teorica (2016). Attività didattica che si colloca nel settore scientifico disciplinare CHIM02, con lezioni frontali ed esercitazioni di laboratorio.

La sua attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e computazionale e le pubblicazioni sono inerenti all' SSD CHIM02. Nel complesso, produzione scientifica molto abbondante e di ottimo livello nel contesto internazionale di riferimento. La discussione pubblica ne evidenzia il lavoro nell'ambito della modellazione di processi fotochimici e di dinamiche di stati eccitati. Il suo approccio è squisitamente computazionale, ma si avvale del confronto con dati sperimentali derivati da tecniche spettroscopiche avanzate, come chiaramente emerso nella discussione. Dopo attenta e dettagliata valutazione dei titoli, del curriculum, delle pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, la Commissione ritiene che è possibile individuare nel Dr. Nenov una personalità scientifica originale e molto matura, in grado di svolgere in piena autonomia progetti di ricerca avanzata.

Candidato Dott. **Sergio Rampino**.

Vengono attribuiti per i titoli complessivi punti **46/100**, calcolati secondo la seguente tabella

Titoli	Punti
Dottorato di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'estero; max. punti 10	10
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero; max. punti 9	6
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; max. punti 12	12
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi; max. punti 9	9
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; max. punti 6	6
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca max. punti 4	3

Vengono altresì attribuiti alle pubblicazioni complessivi punti **41,5/100**, 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 1)	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 Tototale assegnato
1	1	0,5	0,5	1	2
2	1	0,5	0,5	1	2
3	1	0,5	0	1	1,5
4	1	0,5	0,5	1	2

MS RR JV

5	1	0,5	0,5	1	2
6	1	0,5	0,5	1	2
7	1	0,5	0,5	1	2
8	1	0,5	0,5	1	2
9	1	0,5	0,5	1	2
10	1	0,5	0,5	1	2
11	1	0,5	0,5	1	2
12	1	0,5	0,5	1	2
13	1	0,5	0,5	1	2
14	1	0,5	0,5	1	2
15	1	0,5	0,5	1	2
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 (database Scopus) (max. 4 punti)					1
Indice di Hirsch delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					2
Impact factor medio dei giornali delle pubblicazioni presentate (max. 4 punti)					2
Consistenza complessiva, intensità e la continuità temporale della produzione (max. punti 8)					7

Il punteggio complessivo ottenuto dal candidato è di punti **87,5/100**.

Dott. Sergio Rampino – giudizio collegiale

Il candidato Dr. Sergio Rampino ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca nel 2011. Ha successivamente svolto continuativa attività di ricerca post-dottorato presso qualificati centri nazionali (Università di Perugia, Scuola Normale Superiore di Pisa) e dal 2017 è RTDA presso la Scuola Normale Superiore. Ha conseguito l'abilitazione a professore di II fascia nel settore concorsuale 03/A2 nel 2018. E' risultato vincitore del premio Elio Scrocco per la chimica teorica nel 2016 e fra i 10 finalisti del Premio Primo Levi. La produzione complessiva è molto buona per collocazione editoriale, originalità e consistenza, focalizzata sulla chimica teorica e computazionale. Intensa e di rilievo la sua partecipazione a congressi in ambito nazionale e internazionale. PI di progetti di calcolo e partecipazione a progetti competitivi a livello nazionale e internazionale.

L'attività didattica è coerente con quella richiesta per l'SSD di riferimento Dopo attenta e dettagliata valutazione dei titoli, del curriculum, delle pubblicazioni presentate e della produzione scientifica complessiva, la Commissione ritiene che il Dott. Sergio Rampino 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 rispondendo in modo esauriente alle osservazioni della Commissione.

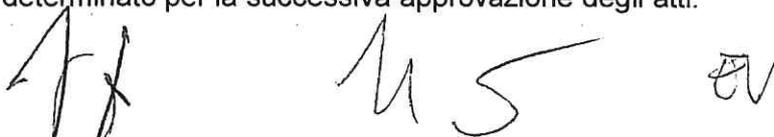
Al termine della discussione con tutti i candidati, la Commissione procede a riesaminare i giudizi espressi, i punteggi attribuiti a ciascun titolo e alle singole pubblicazioni. Dopo attento esame redige la seguente graduatoria di merito dei candidati idonei:

Dott. Artur Nenov punti **96,5/100**

Dott. Agostino Migliore punti **89,5/100**

Dott. Sergio Rampino punti **87,5/100** Dott. Lorenzo Gontrani punti **87,50/100**

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 16,00 la seduta viene tolta.

Bologna, 16 Settembre 2019

PRESIDENTE Prof. Francesco Zerbetto

Francesco Zerbetto

COMPONENTE Prof. Mauro Stener

Mauro Stener

COMPONENTE/SEGRETARIO Prof.ssa Elisabetta Venuti

Elisabetta Venuti

ALLEGATO 1

LORENZO GONTRANI PUBBLICAZIONI						
N	AUTORI	TITOLO	ANNO	RIVISTA	Cit.	IF (5 anni)
1	Di Girolamo D., Dar M.I., Dini D., Gontrani L., Caminiti R., Mattoni A., Graetzel M., Meloni S.	Dual effect of humidity on cesium lead bromide: Enhancement and degradation of perovskite films	2019	Journal of Materials Chemistry A	1	10,172
2	Campetella M., Mariani A., Sadun C., Wu B., Castner E.W., Jr., Gontrani L.	Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques	2018	Journal of Chemical Physics	1	2,840
3	Mariani A., Caminiti R., Ramondo F., Salvitti G., Mocci F., Gontrani L.	Inhomogeneity in Ethylammonium Nitrate-Acetonitrile Binary Mixtures: The Highest "low q Excess" Reported to Date	2017	Journal of Physical Chemistry Letters	4	8,348
4	Gontrani L., Caminiti R., Salma U., Campetella M.	A structural and theoretical study of the alkylammonium nitrates forefather: Liquid methylammonium nitrate	2017	Chemical Physics Letters	4	1,696
5	Campetella M., Bovi D., Caminiti R., Guidoni L., Bencivenni L., Gontrani L.	Structural and vibrational study of 2-MethoxyEthylAmmonium Nitrate (2-OMeEAN): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics	2016	Journal of Chemical Physics	6	2,840
6	Campetella M., Bencivenni L., Caminiti R., Zazza C., Di Trapani S., Martino A., Gontrani L.	Chloromethyl-oxirane and chloromethyl-thiirane in liquid phase: A joint experimental and quantum chemical study	2016	Chemical Physics	4	1,593
7	Tanzi L., Nardone M., Benassi P., Ramondo F., Caminiti R., Gontrani L.	Choline salicylate ionic liquid by X-ray scattering, vibrational spectroscopy and molecular dynamics	2016	Journal of Molecular Liquids	5	4,136
8	Tanzi L., Ramondo F., Caminiti R., Campetella M., Di Luca A., Gontrani L.	Structural studies on choline-carboxylate bio-ionic liquids by x-ray scattering and molecular dynamics	2015	Journal of Chemical Physics	12	2,840
9	Benedetto A., Bodo E., Gontrani L., Ballone P., Caminiti R.	Amino acid anions in organic ionic compounds. An ab initio study of selected ion pairs	2014	Journal of Physical Chemistry B	27	2,996
10	Gontrani L., Nunziante Cesaro S., Stranges S., Bencivenni L., Pieretti A.	FTIR spectra and density functional theory P.E.D. assignments of oxiranes in Ar matrix at 12 K	2014	Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy	3	2,665
11	Bellagamba M., Bencivenni L., Gontrani L., Guidoni L., Sadun C.	Tautomerism in liquid 1,2,3-triazole: A combined energy-dispersive X-ray diffraction, molecular dynamics, and FTIR study	2013	Structural Chemistry	12	1,333
12	Campetella M., Gontrani L., Bodo E., Ceccacci F., Marincola F.C., Caminiti R.	Conformational isomerisms and nano-aggregation in substituted alkylammonium nitrates ionic liquids: An x-ray and computational study of 2-methoxyethylammonium nitrate	2013	Journal of Chemical Physics	26	2,840
13	Gontrani L., Bodo E., Triolo A., Leonelli F., D'Angelo P., Migliorati V., Caminiti R.	The interpretation of diffraction patterns of two prototypical protic ionic liquids: A challenging task for classical molecular dynamics simulations	2012	Journal of Physical Chemistry B	48	2,996
14	Sanna N., Chillemi G., Gontrani L., Grandi A., Mancini G., Castelli S., Zagotto G., Zazza C., Barone V., Desideri A.	UV-vis spectra of the anticancer camptothecin family drugs in aqueous solution: Specific spectroscopic signatures unraveled by a combined computational and experimental study	2009	Journal of Physical Chemistry B	29	2,996
15	Gontrani L., Mennucci B., Tomasi J.	Glycine and alanine: A theoretical study of solvent effects upon energetics and molecular response properties	2000	Journal of Molecular Structure: THEOCHEM	93	1,281

AGOSTINO MIGLIORE PUBBLICAZIONI						
N	AUTORI	TITOLO	ANNO	RIVISTA	Cit.	IF (5 anni)
1	Teo R.D., Rousseau B.J.G., Smithwick E.R., Di Felice R., Beratan D.N., Migliore A.	Charge Transfer between [4Fe4S] Proteins and DNA Is Unidirectional: Implications for Biomolecular Signaling	2019	Chem	6	18,205
2	Rousseau B.J.G., Shafei S., Migliore A., Stanley R.J., Beratan D.N.	Determinants of Photolyase's DNA Repair Mechanism in Mesophiles and Extremophiles	2018	Journal of the American Chemical Society	2	14,491
3	Jia C., Migliore A., Xin N., Huang S., Wang J., Yang Q., Wang S., Chen H., Wang D., Feng B., Liu Z., Zhang G., Qu	Covalently bonded single-molecule junctions with stable and reversible photoswitched conductivity	2016	Science	233	43,644

MS R EV

	D.-H., Tian H., Ratner M.A., Xu H.Q., Nitzan A., Guo X.					
4	Zheng L., Polizzi N.F., Dave A.R., Migliore A., Beratan D.N.	Where Is the Electronic Oscillator Strength? Mapping Oscillator Strength across Molecular Absorption Spectra	2016	Journal of Physical Chemistry A	11	2,634
5	Migliore A., Naaman R., Beratan D.N.	Sensing of molecules using quantum dynamics	2015	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	7	10,6
6	Migliore A., Nitzan A.	Irreversibility in redox molecular conduction: Single versus double metal-molecule interfaces	2015	Electrochimica Acta	6	4,94
7	Migliore A., Polizzi N.F., Therien M.J., Beratan D.N.	Biochemistry and theory of proton-coupled electron transfer	2014	Chemical Reviews	193	56,124
8	Livshits G.I., Stern A., Rotem D., Borovok N., Eidelstein G., Migliore A., Penzo E., Wind S.J., Di Felice R., Skourtis S.S., Cuevas J.C., Gurevich L., Kottlyar A.B., Porath D.	Long-range charge transport in single G-quadruplex DNA molecules	2014	Nature Nanotechnology	118	43,34
9	Migliore A., Nitzan A.	Irreversibility and hysteresis in redox molecular conduction junctions	2013	Journal of the American Chemical Society	34	14,491
10	Migliore A., Nitzan A.	Nonlinear charge transport in redox molecular junctions: A marcus perspective	2011	ACS Nano	56	15,149
11	Migliore A.	Nonorthogonality problem and effective electronic coupling calculation: Application to charge transfer in π -stacks relevant to biochemistry and molecular electronics	2011	Journal of Chemical Theory and Computation	40	5,838
12	Sit P.H.-L., Migliore A., Ho M.-H., Klein M.L.	Quantum Mechanical and Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Studies of the Iron-Dioxygen Intermediates and Proton Transfer in Superoxide Reductase	2010	Journal of Chemical Theory and Computation	16	5,838
13	Migliore A.	Full-electron calculation of effective electronic couplings and excitation energies of charge transfer states: Application to hole transfer in DNA π -stacks	2009	Journal of Chemical Physics	26	2,840
14	Migliore A., Comi S., Varsano D., Klein M.L., DiFelice R.	First principles effective electronic couplings for hole transfer in natural and size-expanded DNA	2009	Journal of Physical Chemistry B	47	2,996
15	Migliore A., Sit P.H.-L., Klein M.L.	Evaluation of electronic coupling in transition-metal systems using DFT: Application to the hexa-aquo ferric-ferrous redox couple	2009	Journal of Chemical Theory and Computation	31	5,838

ARTUR NENOV PUBBLICAZIONI

N	AUTORI	TITOLO	ANNO	RIVISTA	Cit.	IF (5 anni)
1	Picchiotti A., Nenov A., Giussani A., Prokhorenko V.I., Miller R.J.D., Mukamel S., Garavelli M.	Pyrene, a Test Case for Deep-Ultraviolet Molecular Photophysics	2019	Journal of Physical Chemistry Letters	0	8,348
2	Borrego-Varillas R., Teles-Ferreira D.C., Nenov A., Conti I., Ganzer L., Manzoni C., Garavelli M., Maria De Paula A., Cerullo G.	Observation of the Sub-100 Femtosecond Population of a Dark State in a Thiobase Mediating Intersystem Crossing	2018	Journal of the American Chemical Society	4	14,491
3	Weingart O., Nenov A., Altoè P., Rivalta I., Segarra-Martí J., Dokukina I., Garavelli M.	COBRAMM 2.0 — A software interface for tailoring molecular electronic structure calculations and running nanoscale (QM/MM) simulations	2018	Journal of Molecular Modeling	2	1,423
4	El-Tahawy M.M.T., Nenov A., Weingart O., Olivucci M., Garavelli M.	Relationship between Excited State Lifetime and Isomerization Quantum Yield in Animal Rhodopsins: Beyond the One-Dimensional Landau-Zener Model	2018	Journal of Physical Chemistry Letters	4	8,348
5	Nenov A., Borrego-Varillas R., Oriana A., Ganzer L., Segatta F., Conti I., Segarra-Martí J., Omachi J., Dapor M., Taioli S., Manzoni C., Mukamel S., Cerullo G., Garavelli M.	UV-Light-Induced Vibrational Coherences: The Key to Understand Kasha Rule Violation in trans -Azobenzene	2018	Journal of Physical Chemistry Letters	16	8,348
6	Aquilante F., Autschbach J., Carlson R.K., Chibolaru L.F., Delcey M.G., De Vico L., Fdez. Galván I., Ferré N., Frutos L.M., Gagliardi L., Garavelli M., Giussani A., Hoyer C.E., Li Manni G., Lischka H., Ma D., Malmqvist P.Å., Müller T., Nenov	Molcas 8: New capabilities for multiconfigurational quantum chemical calculations across the periodic table	2016	Journal of Computational Chemistry	56 3	3,636

MS

Pa EV

	A., Olivucci M., Pedersen T.B., Peng D., Plasser F., Pritchard B., Reiher M., Rivalta I., Schapiro I., Segarra-Martí J., Stenrup M., Truhlar D.G., Ungur L., Valentini A., Vancoillie S., Veryazov V., Vysotskiy V.P., Weingart O., Zapata F., Lindh R.					
7	Nenov A., Mukamel S., Garavelli M., Rivalta I.	Two-Dimensional Electronic Spectroscopy of Benzene, Phenol, and Their Dimer: An Efficient First-Principles Simulation Protocol	2015	Journal of Chemical Theory and Computation	11	5,838
8	Nenov A., Giussani A., Segarra-Martí J., Jaiswal V.K., Rivalta I., Cerullo G., Mukamel S., Garavelli M.	Modeling the high-energy electronic state manifold of adenine: Calibration for nonlinear electronic spectroscopy	2015	Journal of Chemical Physics	28	2,840
9	Nenov A., Segarra-Martí J., Giussani A., Conti I., Rivalta I., Dumont E., Jaiswal V.K., Altavilla S.F., Mukamel S., Garavelli M.	Probing deactivation pathways of DNA nucleobases by two-dimensional electronic spectroscopy: First principles simulations	2015	Faraday Discussions	22	3,759
10	Polli D., Rivalta I., Nenov A., Weingart O., Garavelli M., Cerullo G.	Tracking the primary photoconversion events in rhodopsins by ultrafast optical spectroscopy	2015	Photochemical and Photobiological Sciences	18	2,480
11	Nenov A., Giussani A., Fingerhut B.P., Rivalta I., Dumont E., Mukamel S., Garavelli M.	Spectral lineshapes in nonlinear electronic spectroscopy	2015	Physical Chemistry Chemical Physics	16	3,963
12	Nenov A., Rivalta I., Cerullo G., Mukamel S., Garavelli M.	Disentangling peptide configurations via two-dimensional electronic spectroscopy: Ab initio simulations beyond the Frenkel exciton hamiltonian	2014	Journal of Physical Chemistry Letters	25	8,348
13	Nenov A., Schreier W.J., Koller F.O., Braun M., De Vivie-Riedle R., Zinth W., Pugliesi I.	Molecular model of the ring-opening and ring-closure reaction of a fluorinated indolylfulgide	2012	Journal of Physical Chemistry A	14	2,634
14	Nenov A., De Vivie-Riedle R.	Geometrical and substituent effects in conical intersections: Linking chemical structure and photoreactivity in polyenes	2011	Journal of Chemical Physics	17	2,840
15	Nenov A., Kölle P., Robb M.A., De Vivie-Riedle R.	Beyond the van der Lugt/Oosterhoff model: When the conical intersection seam and the S1 minimum energy path do not cross	2010	Journal of Organic Chemistry	38	4,224

SERGIO RAMPINO PUBBLICAZIONI						
N	AUTORI	TITOLO	ANNO	RIVISTA	Cit.	IF (5 anni)
1	Paoloni L., Rampino S., Barone V.	Potential-Energy Surfaces for Ring-Puckering Motions of Flexible Cyclic Molecules through Cremer-Pople Coordinates: Computation, Analysis, and Fitting	2019	Journal of Chemical Theory and Computation	0	5,838
2	Salvadori A., Fuse M., Mancini G., Rampino S., Barone V.	Diving into chemical bonding: An immersive analysis of the electron charge rearrangement through virtual reality	2018	Journal of Computational Chemistry	11	3,636
3	Obenchain D.A., Spada L., Alessandrini S., Rampino S., Herbers S., Tasinato N., Mendolicchio M., Kraus P., Gauss J., Puzzarini C., Grabow J.-U., Barone V.	Unveiling the Sulfur-Sulfur Bridge: Accurate Structural and Energetic Characterization of a Homochalcogen Intermolecular Bond	2018	Angewandte Chemie - International Edition	5	12,359
4	De Santis M., Rampino S., Quiney H.M., Belpassi L., Storch L.	Charge-displacement analysis via natural orbitals for chemical valence in the four-component relativistic framework	2018	Journal of Chemical Theory and Computation	3	5,838
5	Fuse M., Rimoldi I., Facchetti G., Rampino S., Barone V.	Exploiting coordination geometry to selectively predict the σ -donor and π -acceptor abilities of ligands: A back-and-forth journey between electronic properties and spectroscopy	2018	Chemical Communications	10	5,989
6	Fuse M., Rimoldi I., Cesarotti E., Rampino S., Barone V.	On the relation between carbonyl stretching frequencies and the donor power of chelating diphosphines in nickel dicarbonyl complexes	2017	Physical Chemistry Chemical Physics	11	3,963
7	Rampino S.	Configuration-Space Sampling in Potential Energy Surface Fitting: A Space-Reduced Bond-Order Grid Approach	2016	Journal of Physical Chemistry A	8	2,634
8	Bistoni G., Rampino S., Scafuri N., Ciancaleoni G., Zuccaccia D., Belpassi L., Tarantelli F.	How π back-donation quantitatively controls the CO stretching response in classical and non-classical metal carbonyl complexes	2016	Chemical Science	51	8,921




9	Rampino S., Pastore M., Garcia E., Pacifici L., Lagana A.	On the temperature dependence of the rate coefficient of formation of C ₂ from C + CH ⁺	2016	Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	10	4,986
10	Urzua-Leiva R.A., Rampino S., Arratia-Perez R., Mosconi E., Pastore M., Angelis F.D.	Thermal Fluctuations on Förster Resonance Energy Transfer in Dyadic Solar Cell Sensitizers: A Combined Ab Initio Molecular Dynamics and TDDFT Investigation	2015	Journal of Physical Chemistry C	4	4,537
11	Rampino S., Storchi L., Belpassi L.	Gold-superheavy-element interaction in diatomics and cluster adducts: A combined four-component Dirac-Kohn-Sham/charge-displacement study	2015	Journal of Chemical Physics	8	2,840
12	Bistoni G., Rampino S., Tarantelli F., Belpassi L.	Charge-displacement analysis via natural orbitals for chemical valence: Charge transfer effects in coordination chemistry	2015	Journal of Chemical Physics	32	2,840
13	Rampino S., Belpassi L., Tarantelli F., Storchi L.	Full parallel implementation of an all-electron four-component Dirac-Kohn-Sham program	2014	Journal of Chemical Theory and Computation	7	5,838
14	Rampino S., Faginas Lago N., Lagana A., Huarte-Larranaga F.	An extension of the grid empowered molecular simulator to quantum reactive scattering	2012	Journal of Computational Chemistry	16	3,636
15	Rampino S., Skouteris D., Lagana A., Garcia E., Saracibar A.	A comparison of the quantum state-specific efficiency of N + N ₂ reaction computed on different potential energy surfaces	2009	Physical Chemistry Chemical Physics	17	3,963

MS

AR