



**ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA**

PROCEDURA VALUTATIVA AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 5 DELLA L. 240/2010 DEL DOTT. Artur Nenov, RTD B) DEL DIPARTIMENTO DI Chimica Industriale "Toso Montanari"

VERBALE

Alle ore 16.45 del giorno 8 luglio 2022 i seguenti Professori:

- Prof. Paolo Foggi- Professore presso l'Università di Perugia
- Prof. Mauro Stener- Professore presso l'Università di Trieste
- Prof. Francesco Paolucci - Professore presso l'Università di Bologna

componenti della Commissione nominata con D.R. n. 907/2022 del 12/06/2022, si riuniscono avvalendosi degli strumenti telematici di lavoro collegiali, previsti dall'art.8 comma 11 del Regolamento emanato con D.R. 977/2013.

Ognuno dei componenti dichiara di non avere relazioni di parentela ed affinità entro il 4° grado incluso con gli altri commissari e con il candidato che non sussistono le cause di astensione di cui all'art. 51 c.p.c.

La Commissione procede alla nomina del Presidente nella persona del Prof. Paolo Foggi e del Segretario nella persona del Prof. Francesco Paolucci.

La Commissione, esaminati gli atti normativi e regolamentari che disciplinano lo svolgimento delle procedure valutative (Legge 240/2010; D.M. 344/2011; il D.R. 977/2013) prende atto degli standard qualitativi e dei criteri di valutazione delle pubblicazioni stabiliti dal dipartimento.

Nel rispetto dei punteggi massimi previsti, la Commissione dettaglia e specifica i punteggi attribuibili agli elementi appartenenti a ciascuna categoria di standard, come da allegata tabella (allegato 1).

La Commissione definisce inoltre che la valutazione avrà esito positivo qualora il candidato uguali o superi il punteggio complessivo di 65/100.

La Commissione prende visione della documentazione resa disponibile con modalità telematiche relativa al candidato, dott. Artur Nenov, ai fini della valutazione.

I Commissari si impegnano a trattare le pubblicazioni del candidato esclusivamente nell'ambito della presente procedura valutativa.

La Commissione avvia la fase di valutazione, compilando la scheda di valutazione allegata al presente verbale (allegato 2).

Al termine della valutazione il candidato ha ottenuto il punteggio di 88/100 e pertanto la Commissione, all'unanimità, specifica che la valutazione ha avuto esito positivo/negativo.

Il segretario verbalizzante rilegge il verbale della riunione telematica ai colleghi della Commissione e, alle ore 18.00, la Commissione considera conclusi i lavori. Il presente verbale è integrato dalle dichiarazioni d'adesione e dal documento d'identità fatti pervenire dai singoli componenti della commissione di valutazione.

Il verbale originale, controfirmato dal segretario verbalizzante e corredato delle dichiarazioni di adesione e dai documenti d'identità degli altri commissari, unitamente alla documentazione del candidato ed al materiale d'uso del concorso, è reso al Responsabile del procedimento concorsuale presso l'Ufficio Ricercatori a tempo determinato per la successiva approvazione degli atti.

Prof. Francesco Paolucci

Collegato telematicamente Prof. Paolo Foggi

Collegato telematicamente Prof. Mauro Stener

Allegato 1 – scheda di valutazione del Dott. Artur Nenov

Attività didattica - (Punti attribuibili max 30)

ATTIVITA'	PUNTI 30
<p>Il volume e la continuità delle attività con particolare riferimento agli insegnamenti e ai moduli di cui si è assunta la responsabilità</p> <p><i>Da 60 a 70 ore di attività didattica per anno accademico nella media degli ultimi 3 anni punti 8</i></p> <p><i>Da 71 a 90 ore di attività didattica per anno accademico nella media degli ultimi 3 anni punti 12</i></p> <p><i>Da 91 a 120 ore di attività didattica per anno accademico nella media degli ultimi 3 anni punti 15</i></p>	15
<p>Didattica integrativa e di servizio agli studenti</p> <p><i>Relatore o correlatore di laurea triennale fino a 2</i></p> <p><i>Relatore o correlatore di laurea magistrale fino a 3</i></p> <p><i>Relatore o correlatore di dottorato.... Fino a 5</i></p>	10
<p>Esiti della valutazione da parte degli studenti dei moduli o degli insegnamenti tenuti</p> <p><i>Percentuale di risposte positive per i requisiti sulla presenza e puntualità compresa tra 50 e 80%. Fino a 2 punti</i></p> <p><i>Percentuale di risposte positive per i requisiti sulla presenza e puntualità compresa tra 81 e 100%. fino a 3 punti</i></p> <p><i>Percentuale di risposte positive per i requisiti sulla presenza e puntualità compresa tra 50 e 80% e risposte positive per il requisito sulla soddisfazione complessiva per l'insegnamento superiore o uguale a 80% per ciascuna delle attività formative per l'ultimo triennio fino a 4 punti</i></p> <p><i>Percentuale di risposte positive per i requisiti sulla presenza e puntualità compresa tra 81 e 100% e risposte positive per il requisito sulla soddisfazione complessiva per l'insegnamento superiore o uguale a 80% per ciascuna delle attività formative per l'ultimo triennio fino a 5 punti</i></p>	5

Attività di ricerca e pubblicazioni – (Punti attribuibili max 65)

Tabella A - Attività di ricerca

ATTIVITA'	PUNTI 25
<p>Organizzazione direzione e coordinamento gruppi di ricerca –</p> <p>Coordinamento di progetti di ricerca (fino a 3)</p> <p>da 1 a 2 progetti punti 2</p> <p>oltre 2 progetti punti 3</p> <p>partecipazione a progetti di ricerca (fino a 2)</p> <p>da 1 a 2 progetti punti 1</p> <p>oltre 2 progetti punti 2</p>	Fino a 5
<p>Titolarità di brevetti</p> <p><i>da 1 a 2 brevetti punti 2</i></p> <p><i>da 3 a 4 punti 4</i></p> <p><i>Più di 4 punti 5</i></p>	5
<p>Conseguimento di premi nazionali e internazionali</p> <p><i>Premi di rilevanza nazionale</i></p> <p><i>1 premio punti 1</i></p> <p><i>Più di 1 premio punti 2</i></p> <p><i>Premi di rilevanza internazionale</i></p> <p><i>1 premio punti 2</i></p> <p><i>Più di 1 premio punti 3</i></p>	5
<p>Consistenza complessiva della produzione scientifica</p>	10

Elevata continuità con numero medio di pubblicazioni/anno nel triennio > 2 Punti 10	
Elevata continuità con numero medio di pubblicazioni/anno nel triennio tra 0 e 2 Punti 8	
Buona continuità con numero medio di pubblicazioni/anno nel triennio > 2 Punti 8	
Buona continuità con numero medio di pubblicazioni/anno nel triennio tra 0 e 2 Punti 6	
Scarsa continuità con numero medio di pubblicazioni/anno nel triennio > 2 Punti 4	
Scarsa continuità con numero medio di pubblicazioni/anno nel triennio tra 0 e 2 Punti 2	

Tabella B - Pubblicazioni

PUBBLICAZIONI	PUNTI 40
Ogni singola opera sarà valutata sulla base di: 1) congruenza con il settore scientifico- disciplinare; 2) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione; 3) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica; 4) apporto individuale del ricercatore nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione.	
monografie (per ogni singola opera)	Max 3
articoli (per ogni singola opera)	Max 1
capitoli in libri (per ogni singola opera)	Max 0,5

Totale punti attività di ricerca e pubblicazioni (tabella A+ tabella B) = 65

Attività istituzionali (Punti attribuibili max 5)

ATTIVITA' ISTITUZIONALI	PUNTI 5
Delegato o membro di Commissioni dipartimentali o in seno ai Corsi di laurea o nel collegio di Dottorato fino a 3 punti	
Coordinamento di iniziative o manifestazioni di Ateneo e del Dipartimento o incarichi presso rilevanti enti pubblici e privati e organizzazioni scientifiche e culturali fino a 2 punti	

Allegato 2 – scheda di valutazione del Dott. Artur Nenov**Attività didattica - (Punti attribuibili max 30)**

ATTIVITA'	PUNTI 27
<p>Il volume e la continuità delle attività con particolare riferimento agli insegnamenti e ai moduli di cui si è assunta la responsabilità <i>titolare insegnamento 66682 - FISICA CON ESERCITAZIONI (Modulo 2) Campus: Rimini Corso: Laurea in Chimica e tecnologie per l'ambiente e per i materiali (18/19: 50h, 19/20: 60h, 20/21: 60h, 21/22: 35h)</i> 88377 - PHYSICAL CHEMISTRY OF MATERIALS FOR ENERGY AND ENVIRONMENT (Modulo 2) Campus: Bologna Corso:Laurea Magistrale in Low carbon technologies and sustainable chemistry (19/20: 25h, 20/21: 25h, 21/22: 25h) 66689 - CHIMICA FISICA II CON LABORATORIO (Modulo 2) Campus: Bologna Corso: Laurea in Chimica industriale (21/22: 50h)</p> <p><i>Media negli ultimi 3 anni: 93 ore</i></p>	15
<p>Didattica integrativa e di servizio agli studenti <i>PhD: Mohsen M. El-Tahawy (2014-2017), Flavia Aleotti (2019-2022): 4 punti</i> <i>Msc.: Ettore Paltanin (2018), Laurel Lynn Mc Clure (2021-2022): 2 punti</i> <i>Bsc.: Simone Ugolini (2020-2021): 1 punto</i></p>	7
<p>Esiti della valutazione da parte degli studenti dei moduli o degli insegnamenti tenuti <i>Percentuale di risposte positive per i requisiti sulla presenza e puntualità compresa tra 81 e 100% e risposte positive per il requisito sulla soddisfazione complessiva per l'insegnamento superiore o uguale a 80% per ciascuna delle attività formative per l'ultimo triennio:</i></p>	5

Attività di ricerca e pubblicazioni – (Punti attribuibili max 65)

Tabella A - Attività di ricerca

ATTIVITA'	PUNTI 18
<p>Organizzazione direzione e coordinamento gruppi di ricerca – Coordinamento di progetti di ricerca (fino a 3) 1 progetto: punti 2 partecipazione a progetti di ricerca (fino a 2) oltre 2 progetti: punti 2</p>	4
Titolarità di brevetti	0
<p>Conseguimento di premi nazionali e internazionali 1 premio di rilevanza nazionale: punti 1 Più di 1 premio punti 2 3 premi di rilevanza internazionale: punti 3</p>	4
<p>Consistenza complessiva della produzione scientifica Elevata continuità con numero medio di pubblicazioni/anno nel triennio = 8: Punti 10</p>	10

Tabella B - Pubblicazioni

PUBBLICAZIONI	PUNTI 40
Ogni singola opera sarà valutata sulla base di: 1) congruenza con il settore scientifico- disciplinare; 2) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione; 3) rilevanza	

<p>scientifico della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica; 4) apporto individuale del ricercatore nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione.</p>	
--	--

titolo	anno	Rivista	Volume	Pagina	originalità (O, max 0.5)	congruenza (C, max. 1)	rilevanza (R, max. 0.25)	apporto (A, max. 0,25)	TOT C*(O+R+A)
Molcas 8: New capabilities for multiconfigurational quantum chemical calculations across the periodic table	2016	<i>Journal of Computational Chemistry</i>	37 (5)	506	0,5	1	0,21	0,15	0,86
Intramolecular photo-induced charge transfer in visual retinal chromophore mimics: electron density-based indices at the TD-DFT and post-HF levels	2016	<i>Theoretical Chemistry Accounts</i>	135 (4)	96	0,3	1	0,21	0,15	0,66
Ultraviolet vision: photophysical properties of the unprotonated retinyl Schiff base in the Siberian hamster cone pigment	2016	<i>Theoretical Chemistry Accounts</i>	135 (4)	110	0,3	1	0,21	0,15	0,66
Spectroscopic fingerprints of DNA/RNA pyrimidine nucleobases in third-order nonlinear electronic spectra	2016	<i>Theoretical Chemistry Accounts</i>	135 (5)	121	0,3	1	0,21	0,15	0,66
Multiple Decay Mechanisms and 2D-UV Spectroscopic Fingerprints of Singlet Excited Solvated Adenine-Uracil Monophosphate	2016	<i>Chemistry - A European Journal</i>	22 (22)	7497	0,3	1	0,22	0,15	0,67
Photoelectrochromism in the Retinal Protonated Schiff Base Chromophore: Photoisomerization Speed and Selectivity under a Homogeneous Electric Field at Different Operational Regimes	2016	<i>Journal of Chemical Theory and Computation</i>	12 (9)	4460	0,3	1	0,23	0,25	0,78
Resolving Ultrafast Photoinduced Deactivations in Water-Solvated Pyrimidine Nucleosides	2017	<i>Journal of Physical Chemistry Letters</i>	8 (8)	1777	0,4	1	0,23	0,15	0,78
Photophysics of Deoxycytidine and 5-Methyldeoxycytidine in Solution: A Comprehensive Picture by Quantum Mechanical Calculations and Femtosecond Fluorescence Spectroscopy	2017	<i>Journal of the American Chemical Society</i>	139 (23)	7780	0,4	1	0,25	0,25	0,9
Multiple Electronic and Structural Factors Control Cyclobutane Pyrimidine Dimer and 6–4 Thymine–Thymine Photodimerization in a DNA Duplex	2017	<i>Chemistry - A European Journal</i>	23 (60)	15177	0,4	1	0,22	0,15	0,77
On the Simulation of Two-dimensional Electronic Spectroscopy of Indole-containing Peptides	2017	<i>Photochemistry and Photobiology</i>	93 (6)	1368	0,3	1	0,21	0,25	0,76
UV-induced long-lived decays in solvated pyrimidine nucleosides resolved at the MS-CASPT2/MM level	2018	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i>	20 (10)	6877	0,4	1	0,21	0,15	0,76
The effect of solvent relaxation in the ultrafast time-resolved spectroscopy of solvated benzophenone	2018	<i>Photochemical and Photobiology</i>	17 (3)	323	0,3	1	0,22	0,15	0,67

Two-dimensional electronic spectroscopy as a tool for tracking molecular conformations in DNA/RNA aggregates	2018	<i>Faraday Discussions</i>	207	233	0,3	1	0,22	0,15	0,67
Impacts of hydroxylation on the photophysics of chalcones: Insights into the relation between the chemical composition and the electronic structure	2018	<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i>	20 (13)	8924	0,3	1	0,21	0,25	0,76
Photoinduced formation mechanism of the thymine-thymine (6-4) adduct in DNA; A QM(CASPT2//CASSCF):MM(A MBER) study	2018	<i>Faraday Discussions</i>	207	375	0,3	1	0,22	0,15	0,67
The highly excited-state manifold of guanine: calibration for nonlinear electronic spectroscopy simulations	2018	<i>Theoretical Chemistry Accounts</i>	137 (3)	47	0,3	1	0,21	0,15	0,66
UV-Light-Induced Vibrational Coherences: The Key to Understand Kasha Rule	2018	<i>Journal of Physical Chemistry Letters</i>	9 (7)	1534	0,5	1	0,23	0,25	0,98
Violation in trans -Azobenzene Relationship between Excited State Lifetime and Isomerization Quantum Yield in Animal Rhodopsins: Beyond the One-Dimensional Landau-Zener Model	2018	<i>Journal of Physical Chemistry Letters</i>	9 (12)	3315	0,3	1	0,23	0,25	0,78
Towards Accurate Simulation of Two-Dimensional Electronic Spectroscopy (book chapter)	2018	<i>Topics in Current Chemistry</i>	376 (3)	24	0,3	1	0,24	0,25	0,79
Theoretical Model of the Protochlorophyllide Oxidoreductase from a Hierarchy of Protocols	2018	<i>Journal of Physical Chemistry B</i>	122 (31)	7668	0,3	1	0,21	0,25	0,76
COBRAMM 2.0 — A software interface for tailoring molecular electronic structure calculations and running nanoscale (QM/MM) simulations	2018	<i>Journal of Molecular Modeling</i>	24 (9)	271	0,4	1	0,21	0,25	0,86
Linear absorption spectra of solvated thiouracils resolved at the hybrid RASPT2/MM level	2018	<i>Chemical Physics</i>	515	643	0,3	1	0,21	0,25	0,76
Observation of the Sub-100 Femtosecond Population of a Dark State in a Thiobase Mediating Intersystem Crossing	2018	<i>Journal of the American Chemical Society</i>	140 (47)	16087	0,5	1	0,25	0,25	1
Two-dimensional UV spectroscopy: A new insight into the structure and dynamics of biomolecules	2019	<i>Chemical Science</i>	10 (43)	9907	0,4	1	0,24	0,25	0,89
QM/MM Photodynamics of Retinal in the Channelrhodopsin Chimera C1C2 with OM3/MRCI	2019	<i>ChemPhoto Chem</i>	3 (2)	107	0,3	1	0,21	0,15	0,66
Pyrene, a Test Case for Deep-Ultraviolet Molecular Photophysics	2019	<i>Journal of Physical Chemistry Letters</i>	10 (12)	3481	0,4	1	0,23	0,25	0,88
X-ray linear and non-linear spectroscopy of the ESCA molecule	2019	<i>Journal of Chemical Physics</i>	151 (11)	11411 0	0,3	1	0,22	0,25	0,77
Multidimensional Potential Energy Surfaces Resolved at	2019	<i>Journal of Chemical</i>	15 (12)	6813	0,4	1	0,23	0,25	0,88

the RASPT2 Level for Accurate Photoinduced Isomerization Dynamics of Azobenzene		<i>Theory and Computation</i>								
Exploring the capabilities of optical pump X-ray probe NEXAFS spectroscopy to track photo-induced dynamics mediated by conical intersections	2020	<i>Faraday Discussions</i>	221	245	0,4	1	0,22	0,25	0,87	
Modeling multidimensional spectral lineshapes from first principles: Application to water-solvated adenine	2020	<i>Faraday Discussions</i>	221	219	0,4	1	0,22	0,25	0,87	
Ultrafast spectroscopy of photoactive molecular systems from first principles: Where we stand today and where we are going	2020	<i>Journal of the American Chemical Society</i>	142 (38)	16117	0,5	1	0,25	0,25	1	
Unified Experimental/Theoretical Description of the Ultrafast Photophysics of Single and Double Thionated Uracils	2020	<i>Chemistry - A European Journal</i>	26 (1)	336	0,5	1	0,22	0,25	0,97	
Boron-doped polycyclic aromatic hydrocarbons: A molecular set revealing the interplay between topology and singlet fission propensity	2020	<i>Journal of Physical Chemistry Letters</i>	11 (4)	1390	0,4	1	0,23	0,25	0,88	
Modern quantum chemistry with [open]molcas	2020	<i>Journal of Chemical Physics</i>	152 (21)	4835	0,5	1	0,22	0,15	0,87	
Tailoring Spectral and Photochemical Properties of Bioinspired Retinal Mimics by in Silico Engineering	2020	<i>Angewandte Chemie - International Edition</i>	59 (46)	20619	0,3	1	0,25	0,25	0,8	
Spectral Tuning and Photoisomerization Efficiency in Push-Pull Azobenzenes: Designing Principles	2020	<i>Journal of Physical Chemistry A</i>	124 (46)	9513	0,3	1	0,21	0,25	0,76	
Near-ultraviolet circular dichroism and two-dimensional spectroscopy of polypeptides	2021	<i>Molecules</i>	26 (2)	396	0,3	1	0,22	0,15	0,67	
Photo-Active Biological Molecular Materials: From Photoinduced Dynamics to Transient Electronic Spectroscopies	2021	<i>Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics (book chapter)</i>	31	77	0,3	1	0,2	0,25	0,75	
Imaging conical intersection dynamics during azobenzene photoisomerization by ultrafast X-ray diffraction	2021	<i>Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America</i>	118 (3)	e2022037118	0,5	1	0,25	0,15	0,9	
Manipulating Core Excitations in Molecules by X-Ray Cavities	2021	<i>Physical Review Letters</i>	126 (5)	53201	0,4	1	0,24	0,25	0,89	
Tailored Coumarin Dyes for Photoredox Catalysis: Calculation, Synthesis, and Electronic Properties	2021	<i>ChemCatChem</i>	13 (3)	981	0,4	1	0,22	0,25	0,87	
Parameterization of a linear vibronic coupling model with multiconfigurational electronic	2021	<i>Journal of Chemical Physics</i>	154 (10)	104106	0,4	1	0,22	0,25	0,87	

structure methods to study the quantum dynamics of photoexcited pyrene	2021	<i>Journal of Computational Chemistry</i>	42 (9)	644	0,4	1	0,21	0,15	0,76
iSPECTRON: A simulation interface for linear and nonlinear spectra with ab-initio quantum chemistry software	2021	<i>Journal of Chemical Theory and Computation</i>	17 (11)	7134	0,3	1	0,23	0,15	0,68
In Silico Ultrafast Nonlinear Spectroscopy Meets Experiments: The Case of Perylene Bisimide Dye	2021	<i>Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America</i>	118 (47)	e2116868118	0,3	1	0,25	0,15	0,7
Photoisomerization transition state manipulation by entangled two-photon absorption	2021	<i>Nature Communications</i>	12 (1)	7285	0,3	1	0,25	0,25	0,8
Tracking excited state decay mechanisms of pyrimidine nucleosides in real time	2021	<i>Journal of Physical Chemistry Letters</i>	12 (51)	12300	0,3	1	0,23	0,15	0,68
Conical Intersection Passages of Molecules Probed by X-ray Diffraction and Stimulated Raman Spectroscopy	2022	<i>Journal of Chemical Theory and Computation</i>	18 (2)	605	0,3	1	0,23	0,15	0,68
Coupled Electronic and Nuclear Motions during Azobenzene Photoisomerization Monitored by Ultrafast Electron Diffraction	2022	<i>Journal of Chemical Theory and Computation</i>	18 (2)	1003	0,3	1	0,23	0,15	0,68
Soft X-ray Spectroscopy Simulations with Multiconfigurational Wave Function Theory: Spectrum Completeness, Sub-eV Accuracy, and Quantitative Reproduction of Line Shapes	2022	<i>Journal of Chemical Theory and Computation</i>	18 (5)	3075	0,3	1	0,23	0,25	0,78
Time-Resolved Optical Pump-Resonant X-ray Probe Spectroscopy of 4-Thiouracil: A Simulation Study	2022	<i>Comprehensive Computational Chemistry (book chapter)</i>	accepted	in print	0,3	1	0,2	0,25	0,75

Totale punti attività di ricerca e pubblicazioni (tabella A+ tabella B) = 58

Attività istituzionali (Punti attribuibili max 5)

ATTIVITA' ISTITUZIONALI	PUNTI 3
Delegato o membro di Commissioni dipartimentali o in seno ai Corsi di laurea o nel collegio di Dottorato: 3 punti	3

Somma dei punteggi attribuiti dalla Commissione al candidato 88.00 Punti