

**PROCEDURA PUBBLICA DI SELEZIONE PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, MEDIANTE STIPULA DI UN CONTRATTO DI LAVORO SUBORDINATO DELLA DURATA DI TRE ANNI, AI SENSI DELL'ART 24, COMMA 3, LETTERA A), DELLA LEGGE 30.12.2010, N. 240 E S.M.I., IN RELAZIONE ALLE RISORSE ASSEGNATE CON D.M 10.08.2021 N. 1062, RELATIVO ALLA DOTAZIONE DEL PON "RICERCA E INNOVAZIONE" 2014-2020 – AZIONE IV.6 – CONTRATTI DI RICERCA SU TEMATICHE GREEN, PRESSO IL DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE DELLA VITA E DELLA SOSTENIBILITA' AMBIENTALE PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 "Modelli e metodologie per le scienze chimiche", PROFILO: SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 "Chimica Fisica", INDETTA CON D.R. REP. DR N. 1669/2021 PROT. 242586 DEL 27.09.2021, IL CUI AVVISO DI BANDO È STATO PUBBLICATO NELLA G.U. – IV SERIE SPECIALE N. 77 DEL 28.09.2021**

### **RELAZIONE FINALE**

La Commissione giudicatrice della procedura pubblica di selezione per il reclutamento di un Ricercatore a tempo determinato, per il Settore concorsuale 03/A2 "Modelli e metodologie per le scienze chimiche", PROFILO: SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 "Chimica fisica", presso il Dipartimento di Scienze Chimiche, della Vita e della Sostenibilità Ambientale, nominata con D.R. n. 1853/2021 PROT. 256906 del 18.10.2021 composta da:

Prof. Enrico Cavalli      Professore Ordinario dell'Università degli Studi di Parma  
Prof. Luigi Paduano      Professore Ordinario dell'Università degli Studi di Napoli "Federico II"  
Prof. Elisabetta Venuti   Professore Associato dell'Università degli Studi di Bologna

si riunisce, per via telematica, salvo eventuali ricusazioni che dovessero pervenire da parte dei candidati alla selezione, il giorno 5/11/2021 alle ore 17.00 per la stesura della relazione finale.

La Commissione, sempre presente al completo, ha svolto i propri lavori con il seguente calendario:

il giorno:20/10/2021 alle ore 17:00	determinazione dei criteri di valutazione;
il giorno:03/11/2021 alle ore 14:00	valutazione preliminare dei titoli, dei curriculum e della produzione scientifica dei candidati
il giorno:05/11/2021 alle ore 09:00	discussione dei titoli, della produzione scientifica ed accertamento conoscenza della lingua
il giorno:05/11/2021 alle ore 14:45	attribuzione punteggio ai titoli e a ciascuna pubblicazione
il giorno:05/11/2021 alle ore 17:00	stesura relazione finale

Nella prima riunione telematica del 20/10/2021, ciascun Commissario ha preliminarmente dichiarato di non trovarsi in rapporto di incompatibilità, affinità o parentela, entro il quarto grado incluso, con gli altri componenti della Commissione e che non sussistono le cause di astensione previste dagli art. 51 e 52 del c.p.c., nonché le situazioni previste dall'art. 35-bis del Decreto Legislativo 30.3.2001, n. 165, così come introdotto dalla Legge 6.11.2012, n. 190.

Quindi la Commissione ha provveduto ad eleggere il Presidente nella persona del Prof. Luigi Paduano ed il Segretario nella persona del Prof. Enrico Cavalli.

A seguito della comunicazione del Presidente In merito agli adempimenti previsti dal bando della procedura pubblica di selezione, la Commissione ha quindi provveduto a predeterminare i criteri generali di valutazione dei candidati come di seguito indicati:

80

**TITOLI E CURRICULUM fino a un massimo di punti 40:**

Dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'Estero; <ul style="list-style-type: none"><li>- Attinente al settore concorsuale oggetto del bando: fino a punti 20</li><li>- Parzialmente attinente al settore concorsuale oggetto del bando: fino a punti 10</li><li>- Non attinente al settore concorsuale oggetto del bando: fino a punti 5</li></ul>	punti da 0 a 20
attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero, in relazione alla durata <ul style="list-style-type: none"><li>- Titolarità di corsi: fino a 1 punto/anno</li><li>- Esercitazioni, tutorato, assistenza alla didattica: fino a 0.5 punti/anno</li></ul>	punti da 0 a 2
attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri; <ul style="list-style-type: none"><li>- Periodi di almeno 6 mesi presso istituzioni straniere: fino a 2 punti/periodo (al di fuori del Corso di Dottorato)</li><li>- Borse di ricerca di almeno 4 mesi: fino a 1 punto/borsa</li></ul>	punti da 0 a 6
organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	punti da 0 a 6
titolarità di brevetti	punti da 0 a 1
attività di relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali; <ul style="list-style-type: none"><li>- comunicazioni orali del candidato: fino a 1 punto/com.</li><li>- comunicazioni orali non del candidato: fino a 0.5 punti/com</li><li>- comunicazioni poster: fino a 0.5 punti/com</li></ul>	punti da 0 a 3
conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	punti da 0 a 2

**PRODUZIONE SCIENTIFICA fino a un massimo di punti 60**

Pubblicazioni su riviste nazionali e internazionali prevedendo: per originalità: da 0 a 0.5 per congruenza da 0 a 1 per rilevanza da 0 a 0.5 per apporto individuale da 0 a 0.5 per indici da 0 a 0.5	punti da 0 a 3 per ogni pubblicazione
Monografie per originalità: da 0 a 0.5 per congruenza da 0 a 1 per rilevanza da 0 a 1 per apporto individuale da 0 a 0.5 per indici 0	punti da 0 a 3 per ogni monografia
Interventi a convegni con pubblicazione degli atti	punti 0
Saggi inseriti in opere collettanee	punti 0

Abstract	punti 0
Consistenza complessiva della produzione scientifica (vengono valutate l'intensità media e la continuità della produzione, gli indici bibliometrici di riferimento per il settore (database SCOPUS o WoS), l'enucleazione dell'apporto individuale del candidato, la coerenza con le tematiche del settore concorsuale)	punti da 0 a 21

In seguito la Commissione ha consegnato alla Sig.ra Enrica Martini, il verbale n. 1 "Criteri di valutazione", per la pubblicizzazione sul sito di Ateneo, nella pagina riservata ai concorsi.

Nella seconda riunione telematica del 03/11/2021, relativa alla valutazione preliminare dei titoli, dei curriculum e della produzione scientifica dei candidati, la Commissione ha preso visione dell'elenco di coloro che hanno prodotto istanza di partecipazione alla selezione, che sono risultati essere:

1. 622793
2. 628607
3. 630397
4. 632245

Ciascun Commissario ha, pertanto, dichiarato:

- 1) di aver preso visione del D.P.R. 16.04.2013, n. 62: "*Regolamento recante codice di comportamento dei dipendenti pubblici, a norma dell'art. 54 del Decreto legislativo 30 marzo 2001, n. 165*" e che non sussistono le condizioni previste dagli artt. 6 e 7 del medesimo D.P.R. n. 62/2013;
- 2) che non sussistono situazioni di incompatibilità con i candidati, ai sensi degli artt. 51 e 52 del c.p.c. e di non avere rapporti di parentela o affinità, entro il quarto grado incluso.

La Commissione ha inoltre preso atto che, per la procedura di selezione devono essere prese in considerazione, esclusivamente, pubblicazioni o testi accettati per la pubblicazione secondo le norme vigenti, nonché saggi inseriti in opere collettanee e articoli editi su riviste in formato cartaceo o digitale, con esclusione di note interne o rapporti dipartimentali e che la tesi di dottorato (o equipollente) è presa in considerazione anche in assenza delle condizioni sopra menzionate.

La Commissione ha pertanto effettuato la valutazione preliminare dei titoli, del curriculum e della produzione scientifica dei candidati, in conformità ai criteri ed ai parametri determinati nella prima riunione, esprimendo i giudizi di cui all'allegato A.

Terminata la valutazione preliminare, sono stati ammessi alla discussione pubblica, con la Commissione, dei titoli e della produzione scientifica, tutti i candidati, essendo gli stessi in numero pari o inferiore a sei unità.

Nella terza riunione telematica, svoltasi in data 05/11/2021, la Commissione si è riunita per procedere alla discussione pubblica, da parte dei candidati, dei titoli e della produzione scientifica e all'accertamento della conoscenza della lingua inglese.

Si sono presentati a sostenere il colloquio i seguenti candidati:

1. 622793
2. 630397

Sono risultati assenti, secondo le modalità riportate nel verbale 2, i seguenti candidati:

- 1) 628607
- 2) 632245

Nella quarta riunione telematica del 05/11/2021 sono stati predisposti per ciascun candidato:

- un prospetto in cui sono stati riportati i punteggi attribuiti collegialmente dalla Commissione, ai titoli ed alla produzione scientifica, nonché un giudizio relativo all'accertamento della lingua inglese (allegati 1, 2)

Sulla base dei punteggi complessivi assegnati, la Commissione, all'unanimità, ha individuato il candidato con codice 630397 vincitore della presente procedura pubblica di selezione, ed ha stilato, nel contempo, la seguente graduatoria:

- 1) 630397
- 2) 622793

Alle ore 17.45 la Commissione, terminati i lavori, toglie la seduta.

Letto, approvato e sottoscritto.

LA COMMISSIONE:

Prof. Luigi Paduano  
Prof. Elisabetta Venuti  
Prof. Enrico Cavalli

PRESIDENTE  
COMPONENTE  
SEGRETARIO



## **ALLEGATO A**

**PROCEDURA PUBBLICA DI SELEZIONE PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, MEDIANTE STIPULA DI UN CONTRATTO DI LAVORO SUBORDINATO DELLA DURATA DI TRE ANNI, AI SENSI DELL'ART 24, COMMA 3, LETTERA A), DELLA LEGGE 30.12.2010, N. 240 E S.M.I., IN RELAZIONE ALLE RISORSE ASSEGNATE CON D.M 10.08.2021 N. 1062, RELATIVO ALLA DOTAZIONE DEL PON "RICERCA E INNOVAZIONE" 2014-2020 – AZIONE IV.6 – CONTRATTI DI RICERCA SU TEMATICHE GREEN, PRESSO IL DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE DELLA VITA E DELLA SOSTENIBILITA' AMBIENTALE PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 "Modelli e metodologie per le scienze chimiche", PROFILO: SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 "Chimica Fisica", INDETTA CON D.R. REP. DR N. 1669/2021 PROT. 242586 DEL 27.09.2021, IL CUI AVVISO DI BANDO È STATO PUBBLICATO NELLA G.U. – IV SERIE SPECIALE N. 77 DEL 28.09.2021**

### **GIUDIZI ANALITICI FORMULATI SUI TITOLI, SUL CURRICULUM E SULLA PRODUZIONE SCIENTIFICA**

**Candidato: 622793**

La Commissione procede ad effettuare motivata valutazione, a cui seguirà valutazione comparativa, del curriculum, dei titoli e della produzione scientifica, debitamente documentati, esprimendo i seguenti giudizi:

#### **Commissario Prof. Luigi Paduano**

##### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato ha conseguito una laurea triennale in Chimica e una in Fisica e due lauree magistrali in Chimica Computazionale e Fisica della Materia presso l'Università di Roma la Sapienza. Nel 2014 ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in *Material Science* presso la stessa Università. Dal febbraio 2008 a luglio 2009 ha fruito di una borsa di studio del CASPUR. È stato Post-Doc, da luglio 2015 a luglio 2016, presso l'Università di Pisa e dal 2016 al 2020 presso il CNRS di Parigi. Attualmente ricopre una posizione di Post-Doc presso il CNR di Roma. Ha tenuto un minicorso di *Quantum Chemistry* presso l'ENSCP di Parigi dal titolo "Principi di Chimica Quantistica" è stato co-relatore di una tesi magistrale e co-tutore di una tesi di dottorato. Ha partecipato a diverse scuole Nazionali ed Internazionali su temi di chimica computazionale ed è stato relatore a cinque congressi internazionali. È stato responsabile di due progetti finanziati su temi di chimica computazionale. Il curriculum e i titoli presentati sono congruenti con settore scientifico disciplinare CHIM02 e sono molto buoni in intensità e volume.

##### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato è co-autore di 41 pubblicazioni, pertinenti al settore scientifico disciplinare Chim/02, su riviste internazionali con revisore tra pari che, secondo i parametri bibliometrici riconosciuti dalla comunità di riferimento, si collocano nella fascia medio-alta delle riviste del settore. L'apporto individuale del candidato è ben evidente in quanto in circa la metà dei lavori presentati risulta primo autore e in 10 è autore di riferimento. L'attività scientifica del candidato, congruente con il settore concorsuale, è centrata sulla caratterizzazione, attraverso

metodi computazionali di Quanto Meccanica e Dinamica Molecolare, di materiali. L'intensità e il volume delle pubblicazioni è molto buono. Complessivamente il giudizio sulla produzione scientifica del candidato, anche in riferimento ai parametri bibliometrici accettati dalla comunità di riferimento, è molto buono.

### **Commissario Prof. Elisabetta Venuti**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato ha ricevuto le lauree triennali e magistrali in Chimica e Fisica presso l'Università "La Sapienza" rispettivamente negli anni 2004 e 2006 (Chimica), 2009 e 2011 (Fisica). Da febbraio 2008 a luglio 2009 è stato beneficiario di una borsa di studio del CASPUR (Roma). Ha conseguito a "La Sapienza" il Dottorato in Material Science nel 2014, con tesi dal titolo "Structural studies of ionic liquids by means of X-ray and theoretical methods". Da febbraio 2021 è iscritto alla Laurea Magistrale in Big Data presso la stessa università. Durante il periodo di dottorato si è recato per 4 mesi al Mulliken Centre di Bonn. Ha svolto attività di post-dottorato all'università di Pisa (1 anno, 2015-2016) e al CNRS (4 anni, 2016-2020). Da settembre 2020 l'attività di post-dottorato si svolge al CNR di Roma. Nel 2019 gli è stato finanziato un progetto ISCRA di tipo C dal CINECA; nel 2021 ha ricevuto il finanziamento "MSCA SoE@UNISI 2021" per l'area delle scienze sperimentali.

La sua attività di ricerca si colloca principalmente nel campo della chimica teorica e computazionale. Nel periodo di dottorato si è interessato alla caratterizzazione strutturale di liquidi ionici. Successivamente l'interesse del candidato si è focalizzato sullo studio di proprietà strutturali ed elettroniche di una serie di sistemi (materiali molecolari, proteine, perovskiti), utilizzando sia metodi QM che combinazioni di questi con metodi MD.

È primo autore di 8 dei lavori presentati; di 4 di questi è anche corresponding author: è inoltre corresponding di un ulteriore lavoro. Tutti i lavori sono congruenti al SSD CHIM02. La sua produzione complessiva, anch'essa congruente all'SSD della valutazione, consta di 41 articoli su riviste ISI di medio fattore di impatto. Presenta 5 comunicazioni orali a congressi/incontri internazionali. Ha esperienza didattica apparentemente non molto estesa ma di fatto non quantificabile, e congruente all'SSD. È stato co-supervisore di una tesi di dottorato e di una di master.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Nel complesso, il candidato presenta un solido curriculum che ne evidenzia gli interessi scientifici nell'ambito della chimica computazionale. Ha svolto una attività scientifica di notevole consistenza e qualità caratterizzata da una buona collocazione editoriale anche in considerazione dei parametri bibliometrici di riferimento. Le pubblicazioni presentate e il suo CV riflettono un ricercatore maturo e competente.

Il giudizio sul candidato è molto buono.

### **Commissario Prof. Enrico Cavalli**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato possiede due Lauree triennali, in Chimica ed in Fisica, un Master in Chimica Computazionale (Università di Roma La Sapienza, 2006) ed uno in Fisica della Materia (Università di Roma La Sapienza, 2011). Ha conseguito il Dottorato in Scienza dei Materiali (Università di Roma La Sapienza, 2014) ed attualmente sta frequentando un Master in Big Data. Nell'ambito del Corso di Dottorato in Fisica è stato Visiting Ph.D. Student presso il Mulliken Center di Bonn per un anno (2013-2014). Nel 2008-2009 ha svolto un incarico di ricerca presso l'Università di Roma La Sapienza. Ha ricoperto posizioni di Postdoctoral

80

Researcher presso l'Università di Pisa (1 anno, 2015-2016), presso il CNRS di Parigi (4 anni, 2016-2020) e presso il CNR di Roma (da settembre 2020) dove è attualmente occupato. Ha preso parte a 7 scuole di Chimica Computazionale nel periodo 2012-2021 e conseguito 2 finanziamenti-premio (CINECA e Università di Siena) per progetti presentati. Ha svolto attività didattica di assistenza ai corsi di chimica e fisica nell'ambito del Corso di Laurea di Scienze Naturali (2013-2014) ed ha tenuto un minicorso di Quantum Chemistry presso l'ENSCP di Parigi. È stato co-tutore di una tesi di Dottorato e di una di Laurea Magistrale. Ha presentato 5 comunicazioni orali a Congressi Internazionali. Sulla base di questi elementi, il giudizio comparativo sul curriculum può considerarsi molto buono.

### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato ha pubblicato 41 articoli su riviste internazionali, e figura come primo autore in 19 di questi e come corresponding author in 10. La produzione scientifica è di ottimo livello anche in base ai parametri bibliometrici, sviluppata con continuità temporale a partire dal 2015 e congruente con il settore concorsuale di riferimento. Le competenze del candidato si collocano nell'ambito della Chimica Teorica e Computazionale, applicate allo studio delle dinamiche di stati eccitati e delle interazioni inter- ed intra-molecolari in sistemi complessi di vario genere (organici, inorganici, soluzioni, etc.), principalmente in fase liquida o solida. L'apporto individuale del candidato appare sempre consistente. Il giudizio comparativo sull'attività di ricerca è molto buono.

### **Giudizio collegiale:**

Il candidato possiede due Lauree triennali, in Chimica ed in Fisica, un Master in Chimica ed uno in Fisica, ed il Dottorato in Scienze dei Materiali, tutti conseguiti presso l'Università di Roma La Sapienza. Ha svolto una limitata attività didattica di assistenza nel 2013-2014 ed ha tenuto un minicorso di Quantum Chemistry presso l'ENSCP di Parigi. Ha usufruito di diverse posizioni post-doc presso istituzioni scientifiche sia italiane che straniere. La produzione scientifica, esaminata anche alla luce dei parametri bibliometrici di riferimento della comunità del settore, è di buon livello e congruente col SSD CHIM/02. Il contributo del candidato ai lavori presentati appare consistente. L'attività del candidato si sviluppa nell'ambito della Chimica Teorica e Computazionale, applicate allo studio delle dinamiche di stati eccitati e delle interazioni inter- ed intra-molecolari in sistemi complessi di vario genere. Un suo progetto presentato al 'MSCA So@UNISI 2021' è risultato vincitore ed ammesso al finanziamento. L'attività congressuale è da considerarsi nel complesso discreta. Il giudizio collegiale, sulla base del curriculum, dei titoli presentati e della produzione scientifica, è molto buono.

Per quanto sopra descritto la Commissione, essendo i candidati in numero inferiore a sei ammette il candidato a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

### **Candidato: 628607**

La Commissione procede ad effettuare motivata valutazione, a cui seguirà valutazione comparativa, del curriculum, dei titoli e della produzione scientifica, debitamente documentati, esprimendo i seguenti giudizi:

### **Commissario Prof. Luigi Paduano**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

LC

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica ed il titolo di Dottore di ricerca presso l'Università di Bologna. Dall'ottobre 2014 a maggio 2017 ha ricoperto la posizione di Post-Doc presso l'Università di Bologna e dal settembre 2017 al gennaio 2018 presso l'Università di Ruhr University Bochum (Germania). Attualmente ha una posizione di Post-Doc presso l'Università Keio University (JP). Nell'ambito delle sue attività di ricerca il candidato ha avuto collaborazioni con partner industriali ed è tra gli autori di un brevetto nazionale. È stato relatore, di cui due su invito, in tre congressi nazionali ed internazionali. Nel complesso il curriculum e i titoli presentati, congruenti con settore scientifico disciplinare CHIM02, sono molto buoni in intensità e volume.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato è co-autore di 27 pubblicazioni, pertinenti al settore scientifico disciplinare Chim/02, su riviste internazionali con revisore tra pari che, secondo i parametri bibliometrici riconosciuti dalla comunità di riferimento, si collocano nella fascia medio-alta delle riviste di settore. L'apporto individuale del candidato è significativo visto che in nove dei lavori presentati è primo autore e in uno è autore di riferimento. Il candidato è stato co-autore di quattro capitoli di libri scientifici a diffusione internazionale. L'attività scientifica del candidato è nell'ambito dell'elettrochimica, con particolare riferimento all'elettroluminescenza. L'intensità e il volume delle pubblicazioni è buono. Complessivamente il giudizio sulla produzione scientifica del candidato, anche in riferimento ai parametri bibliometrici accettati dalla comunità di riferimento, è molto buono.

#### **Commissario Prof. Elisabetta Venuti**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato ha ricevuto la Laurea triennale (2007), magistrale (2010) e Dottorato di ricerca (2014) in Chimica presso l'Università di Bologna, con tesi di dottorato dal titolo "Electrospun Polymeric Scaffolds with Enhanced Biomimetic Properties for Tissue Engineering Applications." Da novembre 2012 a gennaio 2013 è stato presso il "Department of Chemical and Biological Sciences, Polytechnic Institute of New York University (USA)". A partire dal 2014 ricopre posizioni di post-dottorato al Dipartimento di Chimica G. Ciamician dell'Università di Bologna (ottobre 2014-maggio 2017); al Department of Chemistry and Biochemistry, Ruhr University Bochum (Ottobre 2017-Gennaio 2018); al Department of Chemistry, Keio University (JP) (da Ottobre 2018- al presente). Presso quest'ultimo dipartimento ha ottenuto nel 2019 un finanziamento dalla Japan Society for the Promotion of Science, per il progetto "Development of novel electrochemiluminescence systems using boron-doped diamond electrodes". Ha ricevuto l'Abilitazione Scientifica Nazionale a Professore Associato per il SSD CHIM02 - 03/A2 nel 2021.

L'attività di ricerca del candidato è focalizzata sull'applicazione di tecniche elettrochimiche per lo studio di fenomeni quali l'elettrochemiluminescenza (ECL), per studi di natura fondamentale e per applicazioni nel campo della sensoristica di diagnostica. In questo ambito si sono intrattenute collaborazioni con Roche Diagnostic e Hitachi High Tech. Per i 12 lavori presentati per questa selezione, il candidato è primo autore in 5 di essi e corrisponding in uno ulteriore. La produzione complessiva consta di 27 lavori su riviste congruenti al SSD di riferimento, di alto e medio fattore di impatto, e di tre capitoli di libro già pubblicati. Non presenta attività didattica o di supporto ad essa.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Complessivamente il candidato è coinvolto in attività di ricerca di carattere sperimentale di notevole interesse e qualità in ambito elettrochimico, che trovano riscontro in una produzione caratterizzata da una collocazione editoriale molto buona con punte di eccellenza. Il numero di articoli/lavori pubblicati è adeguato al numero di anni di attività.

Il giudizio sul candidato è molto buono.

### **Commissario Prof. Enrico Cavalli**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato ha conseguito la Laurea Magistrale in Chimica nel 2007 ed il Dottorato in Chimica nel 2014, sempre presso l'Università di Bologna. Ha ricoperto incarichi postdoc presso l'Università di Bologna (2014-2017), di Bochum, Germania (2017-2018) e di Keio, Giappone (2018-) dove attualmente lavora. Ha conseguito l'abilitazione nazionale per Professore Associato per il settore CHIM/02. Ha partecipato a 10 Congressi sia nazionali che internazionali, con 4 comunicazioni orali di cui 3 su invito. Non presenta alcuna attività didattica. Dichiaro inoltre di aver svolto due progetti di collaborazione con realtà industriali e di aver ottenuto un finanziamento da 'The Japan Society for the Promotion of Science', per un progetto di ricerca svolto tra il 2019 ed il 2021. Sulla base di questi elementi, il giudizio comparativo sul curriculum può considerarsi molto buono.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato ha pubblicato 27 articoli su riviste internazionali. Figura 9 volte come primo autore, 1 come corresponding author. Ha inoltre pubblicato 3 capitoli di libro, un quarto è in preparazione. È titolare, insieme ad altri, di un brevetto giapponese. La produzione scientifica è continua a partire dal 2014 fino ad oggi e si colloca prevalentemente nell'ambito dell'elettrochimica, con particolare riferimento all'elettroluminescenza. Alla luce degli indicatori di riferimento, essa è congruente col settore concorsuale CHIM/02 e di livello molto buono. Il contributo individuale del candidato appare consistente sulla base delle informazioni fornite. Il giudizio comparativo sull'attività di ricerca è molto buono.

### **Giudizio collegiale:**

Il candidato ha conseguito la Laurea Magistrale in Chimica ed il Dottorato in Chimica presso l'Università di Bologna. Ha ricoperto incarichi postdoc presso Università di Bologna, di Bochum, e di Keio, dove attualmente lavora. Non presenta attività didattica. La produzione scientifica, esaminata anche alla luce dei parametri bibliometrici di riferimento della comunità del settore, è di buon livello e congruente col SSD CHIM/02. Il contributo del candidato ai lavori presentati appare consistente. L'attività del candidato si colloca prevalentemente nell'ambito dell'elettrochimica, con particolare riferimento all'elettroluminescenza. Ha svolto due progetti di collaborazione con realtà industriali ed ha ottenuto un finanziamento da 'The Japan Society for the Promotion of Science', per un progetto di ricerca. È co-proprietario di un brevetto nazionale. L'attività congressuale è da considerarsi nel complesso discreta. Il giudizio collegiale, sulla base del curriculum, dei titoli presentati e della produzione scientifica, è molto buono.

Per quanto sopra descritto la Commissione, essendo i candidati in numero inferiore a sei ammette il candidato a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

### **Candidato: 630397**

La Commissione procede ad effettuare motivata valutazione, a cui seguirà valutazione comparativa, del curriculum, dei titoli e della produzione scientifica, debitamente documentati, esprimendo i seguenti giudizi:

80

### **Commissario Prof. Luigi Paduano**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica nel 2014 ed il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche nel 2018 presso l'Università di Parma. Dal 2018 al 2019 ha ricoperto una posizione di Post-Doc presso l'Università di Parma e dal 2019 ricopre la stessa posizione presso l'Institute of Physical and Theoretical Chemistry, Goethe University Frankfurt, Germany. Ha svolto assistenza didattica per l'anno accademico 2020/2021 per il corso "Aktuelle Themen der Physikalischen und Theoretischen Chemie" presso la Goethe University, Frankfurt am Main ed ha partecipato, dal luglio 2018 al settembre 2019, alla commissione di esami di Chimica Fisica presso l'università di Parma come cultore della materia. Ha ricevuto, dalla Società Chimica Italiana, il premio per il miglior articolo scientifico 2020. Ha presentato 20 contributi a Convegni o Congressi nazionali ed internazionali, con 9 presentazioni orali, di cui 1 su invito.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato è co-autore di 9 pubblicazioni, tutte pertinenti al settore scientifico disciplinare Chim/02, su riviste internazionali con revisore tra pari che, secondo i parametri bibliometrici riconosciuti dalla comunità di riferimento, si collocano nella fascia medio-alta delle riviste di settore. L'apporto individuale del candidato è ben evidente in quanto risulta primo autore in cinque dei lavori presentati e in uno è autore di riferimento. L'intensità e il volume delle pubblicazioni, anche in considerazione della giovane età accademica è ottima. L'attività scientifica del candidato è rivolta allo studio dei trasferimenti di energia e di carica in sistemi molecolari complessi attraverso l'utilizzo di metodi di Chimica Teorica e Computazionale. Complessivamente il giudizio sulla produzione scientifica del candidato, anche in riferimento ai parametri bibliometrici accettati dalla comunità di riferimento, è ottimo.

### **Commissario Prof. Elisabetta Venuti**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato ha conseguito le Lauree triennale (2012) e magistrale in Chimica (2014), e il dottorato in Scienze Chimiche (2018) presso l'Università degli Studi di Parma. La tesi di dottorato ha titolo "Electron transfer and magnetism: an exploratory study". Durante il periodo di dottorato, nel 2015 e nel 2016 ha trascorso alcuni mesi al Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research (JNCASR), Bangalore.

Ha lavorato come postdoc all'Università di Parma (2018-2019); all' Institute of Physical and Theoretical Chemistry, Goethe University Frankfurt (2020). Dal 2020 al presente detiene una borsa Alexander von Humboldt presso quest'ultimo istituto.

Nel 2020 ha ricevuto il premio della Società Chimica Italiana per il migliore lavoro dell'anno.

Ha ricevuto la borsa "Focus line A/B "Promotion of independent grant proposals" dal Goethe Research Academy for Early Career Researchers (GRADE), Goethe University Frankfurt (settembre 2021) a supporto della preparazione di domande di finanziamento indipendenti (per esempio ERC starting grants).

L'attività di ricerca del candidato è nel campo della chimica teorica e computazionale. I suoi interessi si collocano nell'implementazione e nell'applicazione di metodi di calcolo QM e ibridi QM/classici per lo studio di trasferimenti e dissipazione di energia in sistemi quantici aperti; analisi di esperimenti di spettroscopia terahertz (THz) "time domain"; proprietà magnetiche ed elettriche di materiali cristallini organici. Per gli 11 lavori presentati per questa selezione, che includono la tesi di dottorato, il candidato è primo autore in 6 di essi e corrisponding di uno ulteriore. Presenta 8 comunicazioni orali a congressi nazionali e internazionali a primo nome, e 12 posters. L'attività didattica comprende 3 tutorati corsi dell'Università di Parma e altre

attività di insegnamento o supporto all'insegnamento congruenti al SSD di riferimento. È stato co-relatore di tesi triennali e magistrali.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Complessivamente il candidato presenta un brillante curriculum, che evidenzia un'intensa attività scientifica di ragguardevole consistenza e qualità, soprattutto se normalizzata alla giovane età scientifica. La produzione scientifica è caratterizzata da una collocazione editoriale ottima, dalla quale si evince molto chiaramente il contributo originale del candidato. Il giudizio sul candidato è ottimo.

#### **Commissario Prof. Enrico Cavalli**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato si è laureato in Chimica con lode nel 2014 presso l'Università di Parma, dove nel 2018 ha conseguito, sempre con lode, il titolo di Dottore di Ricerca in Chimica. Ha svolto un incarico di ricerca postdoc presso l'Università di Parma (2018-2019) e dal 2020 lavora presso l'Università Goethe di Francoforte, avendo ottenuto una borsa di ricerca di due anni (Alexander von Humboldt Postdoctoral Fellow). Ha inoltre un premio dalla Società Chimica Italiana nel 2020 per il contributo dato allo sviluppo di un modello teorico per il trasferimento di energia in sistemi disordinati. Ha presentato 20 contributi a Convegni o Congressi di carattere nazionale ed internazionale, con 9 presentazioni orali, di cui 1 su invito. Dichiara attività didattica di assistenza in laboratorio studenti e di co-tutoring nella preparazione di tesi di Laurea presso l'Università di Parma (2014-2019), e nell'ambito un corso di Laurea Magistrale presso l'Università Goethe di Francoforte (2020-2021). Sulla base di questi elementi, il giudizio comparativo sul curriculum può considerarsi molto buono.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato ha pubblicato 9 articoli su riviste internazionali. Figura 6 volte come primo autore, 1 come corresponding author. La produzione scientifica si articola nel campo della Chimica Teorica e Computazionale, applicate allo studio dei trasferimenti di energia e di carica in sistemi molecolari di varia complessità. Alla luce degli indicatori bibliometrici di riferimento, la produzione scientifica del candidato può considerarsi molto buona. L'apporto individuale del candidato appare sempre consistente. Il giudizio comparativo sull'attività di ricerca del candidato va valutato nei limiti imposti dalla sua giovane età, ed è molto buono.

#### **Giudizio collegiale:**

Il candidato si è laureato in Chimica ed ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Chimica presso l'Università di Parma. Ha svolto un incarico di ricerca postdoc presso l'Università di Parma ed attualmente lavora presso l'Università Goethe di Francoforte in quanto vincitore di una borsa di ricerca biennale. Ha svolto una limitata attività didattica di assistenza (2015-2017), è stato correlatore di tesi di laurea ed ha fatto parte di commissioni di esame in qualità di Cultore della Materia per il SSD CHIM/02. Ha fatto inoltre assistenza didattica e partecipato alla commissione degli esami di profitto per un corso di Chimica Teorica presso l'Università di Francoforte nel 2020-2021. Ha pubblicato 9 articoli su riviste internazionali, tutte di buon livello alla luce degli indicatori bibliometrici. L'apporto individuale del candidato appare sempre consistente. La produzione scientifica si articola nel campo della Chimica Teorica e Computazionale, applicate allo studio dei trasferimenti di energia e di carica in sistemi molecolari di varia complessità. L'attività congressuale è consistente ed intensa. Il giudizio collegiale, sulla base del curriculum, dei titoli presentati e della produzione scientifica, anche in considerazione della giovane età accademica del candidato, è ottimo.

8C

Per quanto sopra descritto la Commissione, essendo i candidati in numero inferiore a sei ammette il candidato a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

**Candidato: 632245**

La Commissione procede ad effettuare motivata valutazione, a cui seguirà valutazione comparativa, del curriculum, dei titoli e della produzione scientifica, debitamente documentati, esprimendo i seguenti giudizi:

**Commissario Prof. Luigi Paduano**

**Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato si è laureato in Chimica presso l'Università di Napoli Federico II nel 1998 ed ha conseguito un Dottorato di Ricerca in Chimica nel 2002, presso l'Università di Salerno ed un Dottorato in Bioinformatica e Biologia Computazionale nel 2013 presso l'Università di Napoli Federico II. Dal 2002 al 2004 ha svolto attività di ricerca presso l'Università di Salerno, da ottobre a dicembre 2004 ha usufruito di un contratto di ricerca presso l'università di Napoli Federico II e di un assegno di ricerca di un anno dal 2005 al 2006, presso l'università di Salerno. Dal 2005 è docente a tempo indeterminato della scuola di II grado. Nel periodo 1999-2012 ha partecipato a diversi Congressi e Workshop, soprattutto in ambito nazionale. Tuttavia, le indicazioni fornite dal candidato non chiariscono la tipologia dei contributi dichiarati. Il giudizio complessivo sul curriculum e dei titoli presentati è buono.

**Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato presenta è co-autore di 19 pubblicazioni, la gran parte pertinenti al settore scientifico disciplinare Chlm/02, su riviste internazionali con revisore tra pari che, secondo i parametri bibliometrici riconosciuti dalla comunità di riferimento, si collocano nella fascia medio-alta delle riviste di settore. L'apporto individuale del candidato è buono in quanto risulta primo autore in cinque dei lavori presentati e in uno è unico autore. L'intensità e il volume delle pubblicazioni risentono di una interruzione temporale dal 2006, ma può essere considerata sufficiente. L'attività scientifica del candidato è limitata al periodo 2000-2006 ed è incentrata allo studio della risposta molecolare a stimoli esterni attraverso metodi Computazionali. Il giudizio complessivo del candidato, anche in riferimento ai parametri bibliometrici accettati dalla comunità di riferimento, è discreto.

**Commissario Elisabetta Venuti**

**Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica all'Università di Napoli Federico II nel 1998, e il Dottorato di Ricerca in Chimica dall'Università di Salerno nel 2002 con tesi dal titolo "Proprietà di risposta molecolari in presenza di perturbazioni elettriche, magnetiche e elettrodeboli". Ha ottenuto un secondo dottorato di ricerca in Bioinformatica e Biologia Computazionale nel 2013 presso all'Università Federico II con tesi dal titolo "A theoretical protocol for the determination of metal-site structure in metallo protein superfamilies". Dal 2002 al 2004 (2 anni) ha svolto attività di ricerca presso l'Università degli studi di Salerno; ha avuto un contratto di ricerca nel 2004 all'Università di Napoli Federico II ed è stato assegnista per 1 anno (2005-2006) presso l'Università degli studi di Salerno. Dal 2005 è docente di scuola secondaria di secondo grado. L'attività di ricerca del candidato ha riguardato lo studio teorico-computazionale della risposta molecolare a sollecitazioni di natura elettrica e magnetica. Quattro delle pubblicazioni

selezionate per questa selezione hanno il candidato come primo autore e di una di queste è singolo autore, e sono tutte congruenti il SSD CHIM02. Nessuna, tuttavia, è posteriore al 2006, anno in cui sembra cessare l'attività del candidato all'interno di istituzioni di ricerca. Tale considerazione si applica anche alla produzione complessiva con l'ultima pubblicazione dello stesso anno, e alla partecipazione a congressi (16, di cui molti nazionali) che si prolunga tuttavia fino al 2012. 21 sono i lavori complessivi, incluse le due tesi di dottorato, la maggior parte congruenti al settore scientifico disciplinare e pubblicate su riviste ISI a medio fattore di impatto.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

L'attività scientifica del candidato soffre di una forte discontinuità temporale. La produzione scientifica complessiva, valutata anche sulla base dei principali Indicatori bibliometrici, è di livello buono per quanto riguarda la qualità delle pubblicazioni, e pertanto può essere valutata discreta.

#### **Commissario Prof. Enrico Cavalli**

#### **Giudizio analitico del curriculum e dei titoli**

Il candidato si è laureato in Chimica con lode presso l'Università di Napoli Federico II nel 1998. Ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Chimica nel 2002 presso l'Università di Salerno ed un secondo Dottorato in Bioinformatica e Biologia Computazionale nel 2013 presso l'Università di Napoli Federico II. A parte un'attività di ricerca biennale presso l'Università di Salerno (2002-2004), le esperienze del candidato nel campo della didattica e ricerca Universitaria, seppur numerose, rivestono carattere episodico e limitato nel tempo. Dal 2005, il candidato è docente a tempo indeterminato in scuole secondarie di secondo grado. Nel periodo 1999-2012 ha preso parte a diversi Congressi e Workshop, soprattutto in ambito nazionale. Non fornisce tuttavia informazioni circa il tipo di presentazione (orali, poster) ed il contributo individuale nei lavori in collaborazione. Sulla base di questi elementi, il giudizio comparativo sul curriculum può considerarsi discreto.

#### **Giudizio analitico della produzione scientifica**

Il candidato ha pubblicato 19 articoli su riviste Internazionali. Figura 5 volte come primo autore, 1 come autore singolo. La produzione scientifica si articola nel campo della Chimica Teorica e Computazionale, applicate allo studio delle risposte molecolari a vari stimoli esterni. La produzione, congruente al settore scientifico di riferimento e di buon livello alla luce degli indicatori bibliografici di riferimento, è limitata al periodo 2000-2006. Per tali ragioni il giudizio complessivo sull'attività scientifica del candidato può considerarsi discreto.

#### **Giudizio collegiale:**

Il candidato si è laureato in Chimica presso l'Università di Napoli Federico II, ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Chimica presso l'Università di Salerno ed un secondo Dottorato in Bioinformatica e Biologia Computazionale presso l'Università di Napoli Federico II. Ha svolto attività di ricerca a vario titolo presso le Università di Salerno e di Napoli Federico II. Non ha svolto attività didattica in ambito universitario e dal 2005 è docente presso scuole secondarie di secondo grado. Il candidato ha pubblicato 19 articoli su riviste internazionali, la maggioranza di queste pertinenti al settore CHIM/02. La produzione scientifica si articola nel campo della Chimica Teorica e Computazionale, applicate allo studio delle risposte molecolari a vari stimoli esterni. La produzione è di buon livello alla luce degli indicatori bibliografici di riferimento, ed è limitata al periodo 2000-2006. Ha preso parte a diversi Congressi e Workshop, soprattutto in ambito nazionale. Non fornisce tuttavia informazioni circa il tipo di presentazione (orali, poster)

ed il contributo individuale nei lavori in collaborazione. Sulla base di questi elementi, il giudizio comparativo sul curriculum può considerarsi discreto.

Per quanto sopra descritto la Commissione, essendo i candidati in numero inferiore a sei ammette il candidato a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

SC

## ALLEGATO N. 1

**Attribuzione punteggio ai titoli, alla produzione scientifica da parte dei Professori Luigi Paduano, Elisabetta Venuti e Enrico Cavalli all'unanimità e valutazione conoscenza lingua Inglese,**

**Candidato: 622793**

TITOLI E CURRICULUM	Punteggi attribuiti unanimente dalla Commissione
Dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'Estero;	20
attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero, in relazione alla durata	1
attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	6
organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	2
titolarità di brevetti	0
attività di relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	2.5
conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali ed internazionali per attività di ricerca	0
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>	<b>31.5</b>
<b>CONOSCENZA LINGUA (INGLESE)</b>	<b>OTTIMA</b>

La Commissione, essendo concorde sui punteggi da attribuire, decide di predisporre un unico prospetto di valutazione.

### PROSPETTO

**Attribuzione punteggi analitici di cui all'art. 3 del D.M. n. 243/2011 da parte dei Professori Luigi Paduano, Elisabetta Venuti e Enrico Cavalli all'unanimità**

PRODUZIONE SCIENTIFICA	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza (lett. a), comma 2 del D.M.)	Congruenza con il S.C. e con il profilo (S.S.D. (lett. b), comma 2 del D.M.)	Rilevanza scientifica e diffusione nella comunità scientifica (lett. c), comma 2 del D.M.)	Apporto individuale nei lavori in collaborazione (lett. d), comma 2 del D.M.)	Eventuali indici di cui alle lett. a), b), c), d), e e,) (comma 4 del D.M.)	TOTALE
Misfit Layer Compounds: A Platform for Heavily Doped 2D Transition Metal Dichalcogenides	0.5	1	0.5	0.2	0.5	2.7
Automated parameterization of quantum-mechanically derived force-fields including explicit sigma holes: A pathway to	0.5	1	0.5	0.5	0.5	3

*EC*

energetic and structural features of halogen bonds in gas and condensed phase						
Hybrid-functional electronic structure of multilayer graphene	0.5	1	0.2	0.5	0.5	2.7
Following the evolution of excited states along photochemical reaction pathways	0.5	1	0.2	0.5	0.5	2.7
Excited state tracking during the relaxation of coordination compounds	0.5	1	0.2	0.4	0.5	2.6
Quantifying partial hole-particle distance at the excited state: A revised version of the DCT index	0.5	1	0	0.5	0.5	2.5
Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques,	0.5	1	0.5	0.4	0.5	2.9
Hydrogen Bonding Features in Cholinium-Based Protic Ionic Liquids from molecular dynamics simulations	0.5	1	0	0.4	0.5	2.4
Charge transfer excitations in TDDFT: A ghost-hunter index	0.5	1	0.2	0.4	0.5	2.6
Classical Force Fields Tailored for QM Applications: Is It Really a Feasible Strategy?	0.5	1	0.5	0.3	0.5	2.8
Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations	0.5	1	0.5	0.5	0.5	3
An Ab Initio Description of the Excitonic Properties of LH2 and Their Temperature Dependence	0.5	1	0	0.2	0.5	2.2
						32.1
<b>Consistenza complessiva, intensità e</b>	Consistenza, intensità e continuità temporale della produzione scientifica, e coerenza con le tematiche del settore sono valutabili come ottime, anche alla					<b>18</b>

80

<b>continuità temporale (comma 3 del D.M.)</b>	luce dei parametri bibliometrici (WoS), l'apporto individuale è molto buono e riconoscibile anche nell'ambito di ampie collaborazioni.				
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>					<b>50.1</b>

**PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO**

<b>TITOLI E CURRICULUM</b>	<b>31.5</b>
<b>PRODUZIONE SCIENTIFICA</b>	<b>50.1</b>
<b>CONOSCENZA LINGUA (INGLESE)</b>	<b>Ottima</b>
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>	<b>81.6</b>

*82*

## ALLEGATO N. 2

**Attribuzione punteggio ai titoli, alla produzione scientifica da parte dei Professori Luigi Paduano, Elisabetta Venuti e Enrico Cavalli all'unanimità e valutazione conoscenza lingua Inglese,**

**Candidato: 630397**

TITOLI E CURRICULUM	Punteggi attribuiti unanimemente dalla Commissione
Dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'Estero;	20
attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero, in relazione alla durata	2
attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	5
organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	4
titolarità di brevetti	0
attività di relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	3
conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali ed internazionali per attività di ricerca	2
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>	<b>36</b>
<b>CONOSCENZA LINGUA (INGLESE)</b>	<b>OTTIMA</b>

La Commissione, essendo concorde sui punteggi da attribuire, decide di predisporre un unico prospetto di valutazione.

### PROSPETTO

**Attribuzione punteggi analitici di cui all'art. 3 del D.M. n. 243/2011 da parte dei Professori Luigi Paduano, Elisabetta Venuti e Enrico Cavalli all'unanimità**

PRODUZIONE SCIENTIFICA	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza (lett. a), comma 2 del D.M.)	Congruenza con il S.C. e con il profilo (S.S.D. (lett. b), comma 2 del D.M.)	Rilevanza scientifica e diffusione nella comunità scientifica (lett. c), comma 2 del D.M.)	Apporto individuale nei lavori in collaborazione (lett. d), comma 2 del D.M.)	Eventuali Indici di cui alle lett. a), b), c), d), e e,) (comma 4 del D.M.)	TOTALE
Vibrational coherences in charge-transfer dyes: A non-adiabatic picture	0.5	1	0.5	0.3	0.5	2.8
Combining intra- and intermolecular charge-transfer: a new strategy towards molecular ferromagnets and multiferroics	0.5	1	0.5	0.5	0.5	3
Terahertz-pulse driven modulation of electronic	0.5	1	0.2	0.5	0.3	2.5

spectra: Modeling electron-phonon coupling in charge-transfer crystals						
Intermolecular Energy Transfer in Real Time	0.5	1	0.5	0.5	0.5	3
Optical spectra of molecular aggregates and crystals: testing approximation schemes	0.5	1	0.5	0.3	0.5	2.8
Dynamical disorder and resonance energy transfer: a novel quantum-classical approach	0.5	1	0.5	0.5	0.5	3
Antiadiabatic View of Fast Environmental Effects on Optical Spectra	0.5	1	0.5	0.2	0.5	2.7
Quantum dynamical simulations of intra-chain exciton diffusion in an oligo (para-phenylene vinylene) chain at finite temperature	0.5	1	0.5	0.5	0.5	3
Multi-layer Gaussian-based multi-configuration timedependent Hartree (ML-GMCTDH) simulations of ultrafast charge separation in a donor-acceptor complex	0.5	1	0.5	0.5	0.5	3
From Molecules to Materials: Static and Dynamic Properties of Complex Systems (PhD Thesis)	0.5	1	0.5	0.5	0.3	2.8
						28.6
<b>Consistenza complessiva, intensità e continuità temporale (comma 3 del D.M.)</b>	Consistenza, intensità e continuità temporale della produzione scientifica, e coerenza con le tematiche del settore sono valutabili come ottime, anche alla luce dei parametri bibliometrici (WoS). L'apporto individuale appare estremamente originale, anche in considerazione della giovane età del candidato, e il giudizio complessivo è ottimo.					19
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>						47.6

### PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO

<b>TITOLI E CURRICULUM</b>	<b>36</b>
<b>PRODUZIONE SCIENTIFICA</b>	<b>47.6</b>

80

<b>CONOSCENZA LINGUA (INGLESE)</b>	<b>Ottima</b>
<b>PUNTEGGIO COMPLESSIVO</b>	<b>83.6</b>

80