



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

VERBALE 2

(Valutazione preliminare dei candidati e ammissione alla discussione pubblica)

L'anno 2019 il giorno 26 del mese di Agosto alle ore 10:00 si riunisce al completo, per via telematica, ognuno nella propria sede universitaria, la Commissione giudicatrice nominata con D.R. n. 1606/2019 prot. n. 70908 del 22/07/19, pubblicato sul sito internet dell'Università di Messina, della suddetta valutazione comparativa per procedere alla valutazione comparativa dei titoli, dei curricula e della produzione scientifica dei candidati, ivi compresa la tesi di dottorato.

Sono presenti i sotto elencati commissari:

Prof.ssa Angela AGOSTIANO, Professore Ordinario SSD CHIM/02 presso l'Università degli Studi di Bari;
Prof.ssa Loredana LATTERINI, Professore Ordinario SSD CHIM/02 presso l'Università degli Studi di Perugia;
Prof.ssa Concetta DE STEFANO, Professore Ordinario SSD CHIM/01 presso l'Università degli Studi di Messina.

Il Presidente della Commissione comunica che sono trascorsi almeno 7 giorni dalla pubblicizzazione dei criteri e che la Commissione può legittimamente proseguire i lavori.

I componenti accedono, tramite le proprie credenziali, alla piattaforma informatica <https://istanze.unime.it/> e prendono visione dell'elenco dei candidati che risultano essere:

1. Dott. GONTRANI Lorenzo
2. Dott.ssa LA GANGA Giuseppina
3. Dott. MUNAO' Gianmarco

Ciascun Commissario dichiara che non sussistono situazioni di incompatibilità, ai sensi degli artt. 51 e 52 c.p.c. e dell'art. 5, comma 2, del D.Lgs. 1172/1948, con i candidati.

I Componenti della Commissione dichiarano di non avere nessun rapporto di collaborazione scientifica con i candidati dott.ri Gontrani, La Ganga e Munaò.

La Commissione dà atto dell'esistenza della dichiarazione da parte dei candidati riguardo l'inesistenza di rapporti di parentela o di affinità, fino al quarto grado compreso, o di rapporti di coniugio o di convivenza more uxorio con un professore appartenente al Dipartimento che effettua la chiamata, ovvero con il Rettore, con il Direttore Generale o un componente del Consiglio di Amministrazione dell'Università di Messina.

La Commissione procede quindi alla valutazione dei titoli, dei curricula e della produzione scientifica dei candidati, ivi compresa la tesi di dottorato, esprimendo per ciascun candidato un motivato giudizio analitico

sui titoli, sul curriculum e sulla produzione scientifica, ivi compresa la tesi di dottorato, sulla base dei criteri stabiliti nella prima riunione (schema valutazione preliminare Allegato A).

A seguito della valutazione preliminare, sono ammessi alla discussione pubblica i seguenti candidati:

1. Dott. GONTRANI Lorenzo
2. Dott.ssa LA GANGA Giuseppina
3. Dott. MUNAO' Gianmarco

La Commissione viene sciolta alle ore 13:00 e si riconvoca per il giorno **20 Settembre 2019 alle ore 10:00**, presso la sala riunioni del Dipartimento CHIBIOFARAM, secondo piano dell'Incubatore di Imprese (Polo Papardo), Viale F. Stagno d'Alcontres, 31-98166 Messina per la discussione pubblica che dovranno tenere i candidati ammessi come da successivo ALLEGATO B).

Letto approvato e sottoscritto seduta stante.

LA COMMISSIONE

Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente)

Prof.ssa Loredana LATTERINI (Componente)

Prof.ssa Concetta DE STEFANO (Segretario)



ALLEGATO A)

CANDIDATO

Dott. GONTRANI Lorenzo

TITOLI E CURRICULUM

TITOLI VALUTABILI

a) dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'Estero;

Il candidato, Dott. Lorenzo Gontrani, ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in "Scienze Chimiche" XIV ciclo, presso il "Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale" dell'Università degli Studi di Pisa, in data 18/02/2002, discutendo la tesi "*Studio delle proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico con metodi teorici-computazionali. Esempi di applicazioni di metodi teorici di vario tipo e sofisticazione allo studio di sistemi biologici di differente complessità*".

b) eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero

Il candidato presenta per la valutazione la seguente attività didattica:

- Modulo di chimica computazionale e interpretazioni di dati diffrattometrici all'interno del corso "Chimica Fisica III" per Chimica Industriale del Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza", anni accademici 2011-2012, 2012-2013, 2013-2014, 2014-2015, 2015-2016 e 2016-2017, di 20 ore ciascuno (2 CFU), totale 120 ore, e relative esercitazioni frontali al computer.

c) documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri

Il Dott. Gontrani è stato titolare di:

- 9 aprile 2018 - 8 aprile 2019 (**12 mesi**) Assegnista di Ricerca L 240/2010 presso Università di Bologna, Dipartimento di Chimica, "G. Ciamician", argomento della ricerca: "studio teorico e sperimentale del legame alogeno in campioni liquidi";
- 1/02/2016 - 31/01/2017 (**12 mesi**) - Assegnista di ricerca L 240/10 presso l'Università di Roma "La Sapienza" Dipartimento di Chimica, argomento della ricerca: "Utilizzo del prototipo EDXD per ricerca sui liquidi ionici";
- 1 maggio 2014 - 30 aprile 2015 (**12 mesi**) -Assegnista di ricerca L 240/10 presso l'Università di ROMA "La Sapienza", Dipartimento di Chimica;
- 2 maggio/2011 - 1 maggio 2014 (**36 mesi**) - Collaborazione coordinata continuativa nell'ambito del progetto FIRB RBFR086BOQ
- 1 luglio 2009 - 30 giugno 2010 (**12 mesi**) - Assegnista di ricerca presso l'Università degli Studi di ROMA "La Sapienza" Dipartimento di Scienze della Terra;
- 16 novembre 2007 - 15 novembre 2008 (**12 mesi**) - Assegnista di ricerca presso l'Università degli studi di Cagliari;
- 1 giugno 2006 - 1 novembre 2007 (**17 mesi**) - Borsista presso CASPUR - Centro di Applicazioni di Supercalcolo Per Università e Ricerca,
- 1 Ottobre 2002 - 10 Giugno 2006 (**44 mesi**)-Ricercatore presso Colosseum Combinatorial Chemistry Centre for Technology (C4T) - "start-up" biotech tra Università di Roma "Tor Vergata" e Tecnofarmaci S. C. p. A.
- Giugno 2018 (**1 mese**) -Laboratorio QUILL, Queen's University of Belfast, Belfast (Irlanda del Nord, UK),
- dicembre 2009 (**1 mese**) - Laboratoire de Thermodynamique des Solutions et des Polymères - Université Blaise Pascal (Aubière-Clermont-Ferrand). Sviluppo di metodiche per costruire campi di forze per simulazioni classiche di liquidi ionici. Estensione del campo di forze a nuovi gruppi funzionali.

d) organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi

Il dott. Gontrani dichiara di essere stato il Principal investigator dei seguenti progetti finanziati:

- "Modeling of ionic liquids containing WCA", 100000 ore di calcolo FTE, CASPUR computing grant: std12-011, anno 2012;
- "Protic Ionic Liquids", 90000 ore calcolo FTE, CASPUR computing grant: std11-465, anno 2011;
- "Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids" 90000 ore calcolo FTE, CASPUR computing grant: std10-181, anno 2010;
- "Structure and dynamics in Room Temperature Ionic Liquids" 90000 ore calcolo FTE, CASPUR computing grant: std09-320, anno 2009;
- "beamtime" (tempo macchina) presso il sincrotrone ESRF come proponente principale (PI) del progetto CH-5455 dal 20 al 22 aprile 2018.

Il dott. Gontrani ha partecipato ai seguenti progetti di ricerca:

- PRACE TIER0 (17th Access call) "ADRENALINE – hAliDe peRovskites sEqueNtIAL deposItion mEchanism (by ab initio rare events simulations).", 78000000 ore calcolo FTE
- PRACE TIER0 (6th Regular Call). Progetto: "Ab initio molecular dynamics of lanthanides in protic ionic liquids", 8166667 ore calcolo FTE, anno 2013;
- PRACE TIER0 (8th Regular Call). Progetto: "Amino-acid anions in organic compounds: charting the boundary of room temperature Ionic Liquids", 8166667 ore calcolo FTE, anno 2014;
- Progetto Awards Università La Sapienza "Preparation and structural, dynamical and thermodynamical characterization of ionic liquids obtained from natural sources. Study of the interactions between natural ionic liquids and thermosensitive polymers." C26H13MNEB, 55000 euro, anno 2013;
- Progetto FIRB RBFR086BOQ "Structure and dynamics of ionic liquids", 300000 euro, anni 2011-2014;
- Progetto Ateneo C26A113ZNZ "Sintesi e caratterizzazione di nuovi liquidi ionici chirali" 13000 Euro, anno 2011;
- Progetto Ateneo C26A10H5T8 "Protic ionic liquids: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques", (85000 euro, anno 2010);
- Progetto PRIN 2009WHPHRH - "Struttura e Dinamica di Liquidi Ionici e loro miscele", area 03, 231000 euro, anni 2008-2009;
- Progetto Ateneo C26A07TZZM "Studio delle proprietà e caratterizzazione di molecole organiche mediante diffrazione di raggi x e calcoli teorici", 38600 euro, anno 2007;
- Progetto MIUR (MURST) "Individuazione di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di drug design e chimica combinatoriale in una nuova struttura organizzativa", N°Art 11 Legge 451/94 presso C4T, "start-up" biotech tra Università di Roma "Tor Vergata" e Tecnofarmaci S. C. p. A., anni 2002-2006;
- "beamtime" (tempo macchina) presso il sincrotrone ESRF come proponente principale (PI) del progetto CH-5455 "Proton transfer in alkylammonium-based ionic liquids binary mixtures", dal 20 al 22 aprile 2018;

Il candidato dichiara le seguenti collaborazioni di ricerca:

- Prof. Fabio Ramondo (Università dell'Aquila), nell'ambito della caratterizzazione teorica di sistemi liquidi (molecolari e ionici) e di interazioni di legame idrogeno;
- Dott.ssa Francesca Mocchi (Università di Cagliari), nell'ambito della caratterizzazione di liquidi ionici e loro miscele mediante spettroscopia NMR;
- Prof. Leonardo Guidoni (Facoltà di Ingegneria, Università dell'Aquila), nell'ambito della caratterizzazione teorica di sistemi liquidi e solidi con tecniche di dinamica molecolare ab initio (AIMD);
- Dott.ssa Natalia V. Plechkova (QUILL, University of Belfast) riguardo alla caratterizzazione di nuovi liquidi ionici (protici ed aprotici) e delle loro miscele, e di miscele eutettiche bassofondenti (DES);
- Prof. Edward W. Castner (Rutgers University - New Jersey (USA)), riguardante la caratterizzazione di liquidi ionici e miscele con liquidi molecolari mediante spettroscopia PGFSE-NMR e calcoli teorici;
- Dott. Alessandro Mariani – Helmholtz Institut Ulm (HIU, Ulm, Germania), nell'ambito della caratterizzazione modellistica (dinamica molecolare) e diffrattometrica (SAXS) di miscele di liquidi ionici e liquidi molecolari, in diverse condizioni sperimentali;

e) titolarità di brevetti relativamente ai settori concorsuali nei quali è prevista.

Il Candidato non dichiara titolarità di brevetti

f) relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali

Il candidato presenta nel CV n. 22 contributi a congressi e convegni internazionali, di cui n. 15 comunicazioni orali e n. 7 poster. Saranno valutate le seguenti comunicazioni orali, in cui il candidato è il relatore:

1. Gontrani L, Bonomo M, Dini D, Caminiti R, Carboxylic acid DES: thermodynamical and structural characterization, XLVI Congresso della divisione della società chimica italiana, Bologna. 25-28 Giugno 2018.
2. **(su invito)** Di Girolamo D, Gontrani L, Sistema per la diffrazione da raggi-X (XRD), convegno "I primi 5 anni del Laboratorio di Nanotecnologie e Nanoscienze del CNIS", Centro di ricerca CNIS, Università di Roma La Sapienza, 5 Aprile 2017.
3. Gontrani L, Portalone G, Campetella M, Sadun C, Caminiti R, X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics Reveal Halogen Bond in Liquid Acetonitriles, ISXB2, 2nd International Symposium on Halogen Bonding, Göteborg (Svezia), 6-10 Giugno 2016.
4. Bencivenni L, Bodo E, Bovi D, Campetella M, Guidoni L, Gontrani L, Masci G, Lupi S, Ramondo F, Tanzi L Prediction of Infrared Spectra of Ionic Liquids with ab initio Molecular Dynamics, III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, CNR (Roma) 14-16 Dicembre 2015.
5. Gontrani L, Campetella M, Bodo E, Caminiti R. Biocompatible Ionic Liquids: quantum and classical simulation of static and dynamic properties THEOBIO2015, Cagliari, 8-12 Giugno 2015.
6. Gontrani L, Campetella M, Bodo E, Caminiti R. Prepeak in Protic Ionic Liquids: DO classical and QM Simulations reproduce this Medium-Range Order Phenomenon? In Winter Modelling 2014, Modena, 13-14 Marzo 2014.
7. Gontrani L, Padua A. H. H, Caminiti R, Passerini S, Appetecchi G B., Montanino M, Triolo A. Anion conformational patterns and bulk properties in bis(perfluoroalkylsulfonyl)imide - based ionic liquids studied with X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics simulations. In: International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED-2., Roma 9-11 giugno 2010.

g) premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca

Il Candidato ha ricevuto un riconoscimento per attività di ricerca, la pubblicazione "Intriguing transport dynamics of ethylammonium nitrate-acetonitrile binary mixtures arising from nano-inhomogeneity" di Alessandro Mariani, Matteo Bonomo, Boning Wu, Barbara Centrella, Danilo Dini, Edward W. Castner, Jr., Lorenzo Gontrani, Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, 19, 27212-27220 è stata inserita nella collezione "2017 PCCP HOT Articles"

TITOLI NON VALUTABILI

I titoli sottoelencati e presentati dal candidato dott. Lorenzo Gontrani non sono valutabili secondo i criteri stabiliti dalla commissione durante la prima riunione e pubblicati nel verbale n. 1 del 9 Aprile 2019.

- Maturità scientifica presso il Liceo Scientifico "Augusto Righi", Roma, il 7 luglio 1992, con votazione 60/60;
- Laurea in Chimica (Vecchio ordinamento) con lode presso l'Università di Roma "La Sapienza", il 7 aprile 1998;
- Abilitazione a professore di seconda fascia nel settore concorsuale 03/A2 (SSD CHIM/02) con validità 01/12/2014 - 01/12/2020, prorogata per il periodo 31/07/2018 - 31/07/2024;
- Lezioni teorico-pratiche frontali di "Computational Chemistry" e metodiche di "automated docking - virtual screening" nell'ambito dei corsi di formazione per il progetto MIUR N° Art 11 Legge 451/94, nel febbraio 2002 totale 21 ore. L'attività didattica non è valutabile poiché il numero di ore è inferiore a 25.
- Tutoraggio nel laboratorio di Esercitazioni di Preparazioni Chimiche I, anno accademico 1994-1995, corso di Laurea in Chimica - Università di Roma "La Sapienza", totale 150 ore.
- Assegnatario del corso "Metodologie di base della Chimica Computazionale" (6 CFU) per il corso di Dottorato in Scienze Chimiche (XXXIV ciclo) - secondo semestre dell'anno accademico 2018/2019.

Questa attività non è valutabile poiché il candidato non dichiara se alla data di scadenza della presentazione delle domande il corso è stato già espletato.

- Supervisore di attività di tesi di laurea triennale (12), magistrale (6), dottorato di ricerca (6) nel periodo 2010-2018
- Attività di referee per le seguenti riviste: Journal of Physical Chemistry B (American Chemical Society), Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics), Physical Chemistry Chemical Physics, RSC Advances (Royal Society of Chemistry), Research on Chemical Intermediates (Elsevier), Journal of Applied Physics (American Institute of Physics), Journal of Molecular Liquids (Elsevier), Journal of Raman Spectroscopy (Wiley), ACS Sustainable Chemistry & Engineering (American Chemical Society), Topics in Current Chemistry, (American Chemical Society), Computational and Structural Biotechnology Journal (Elsevier Andgewante Chemie International Edition (Gesellschaft Deutscher Chemiker -German Chemical Society, GDCh), Dalton transactions (Royal Society of Chemistry), Structural Chemistry (Elsevier)
- "collection editor" per la pubblicazione del volume Topical Collection "Molecular Liquids" della rivista Molecules (MDPI)
- "Guest Editor" dello Special Issue "Materials Science and X-ray Diffraction" della rivista Symmetry (MDPI)

Non saranno valutati al titolo f) "relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali" i contributi poster a congressi nazionali e internazionali elencati nel CV e le relazioni orali in cui non si evince chiaramente che il candidato ne sia stato il relatore.

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE VALUTABILI

Il candidato è autore in collaborazione di n. 82 pubblicazioni su riviste ISI e n. 2 capitoli di libro ed una curatela, ma ai fini della valutazione allega alla documentazione soltanto le seguenti 30 pubblicazioni. La Commissione, nella formulazione dei giudizi individuali e collegiali terrà, comunque, in considerazione la produzione scientifica complessiva dichiarata dal candidato nel CV.

1. "Intriguing Transport Dynamics of Ethylammonium Nitrate – Acetonitrile Binary Mixtures Arising from Nano-inhomogeneity" di Mariani Alessandro, Bonomo Matteo, Boning Wu, Centrella Barbara, Dini Danilo, Castner Jr Edward W, Gontrani Lorenzo, Physical Chemistry Chemical Physics, 19, 27212-27220 (2017).
2. "Inhomogeneity in Ethylammonium Nitrate-Acetonitrile Binary Mixtures: The Highest "low q Excess" Reported to Date" di Mariani Alessandro, Caminiti Ruggero, Ramondo Fabio, Salvitti Giovanna, Mucci Francesca, Gontrani Lorenzo, Journal of Physical Chemistry Letters, vol. 8, p. 3512-3522 (2017), ISSN: 1948-7185, doi: 10.1021/acs.jpcclett.
3. "Nanoscale Density Fluctuations in Ionic Liquid Binary Mixtures with Nonamphiphilic Compounds: First Experimental Evidence" di Mariani Alessandro, Dattani Rajeev, Caminiti Ruggero, Gontrani Lorenzo, Journal of Physical Chemistry B, vol. 120, p. 10540-10546 (2016), ISSN: 1520-6106, doi: 10.1021/acs.jpcb.6b07295
4. "Structural and Vibrational study of 2-MethoxyEthylAmmonium Nitrate (2-OMeEAN): interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics" di Campetella Marco, Bovi Daniele, Caminiti Ruggero, Guidoni Leonardo, Bencivenni Luigi, Gontrani Lorenzo, Journal of Chemical Physics, 145 (2) 024507 (2017)
5. "Choline-amino acid ionic liquids: past and recent achievements about the structure and properties of these really "green" chemicals" Gontrani Lorenzo. Biophysical Reviews (2018) 10(3), 873-880
6. "Water and hexane in an ionic liquid: computational evidence of association under high pressure" di Mariani A., Caminiti R., Gontrani L., Physical Chemistry Chemical Physics vol. 19, p. 8661-8666 (2017).
7. "X-Ray and Molecular Dynamics Studies of Butylammonium Butanoate-Water Binary Mixtures" di Salma Umme, Usula Marianna, Caminiti Ruggero, Gontrani Lorenzo, Plechkova Natalia V, Seddon Ken R., Physical Chemistry Chemical Physics 19 (3), 1975-1981 (2017)
8. "The Opposite Effect of Water and N-Methyl-2-Pyrrolidone Cosolvents on The Nanostructural Organization of Ethylammoniumbutanoate Ionic Liquid: a Small and Wide Angle X-Ray Scattering and

- Molecular Dynamics Simulations Study” di: Umme Salma, Natalia V Plechkova, Ruggero Caminiti, Lorenzo Gontrani, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 121, p. 6399-6407 (2017)
9. “Structural studies on choline-carboxylate bio-ionic liquids by X-ray scattering and molecular dynamics” di Tanzi Luana, Ramondo Fabio, Caminiti Ruggero, Campetella Marco, Di Luca Andrea, Gontrani Lorenzo, *Choline-Carboxylate Bio-Ionic Liquids by X-ray Scattering and Molecular Dynamics. Journal of Chemical Physics*, 143 (11), 114506 (2016)
 10. “Self-Assembly of Catecholic Moiety-Containing Cationic Random Acrylic Copolymers.” Di Taresco Vincenzo, Gontrani Lorenzo, Crisante Fernanda, Francolini Iolanda, Martinelli Andrea, D’Ilario Lucio, Bordi Federico, Piozzi Antonella, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 119, p. 8369- 8379 (2015)
 11. “Two different models to predict ionic-liquid diffraction patterns: Fixed-charge versus polarizable potentials.” di Campetella Marco, Gontrani Lorenzo, Leonelli Francesca, Bencivenni Luigi, Caminiti Ruggero, *ChemPhysChem*, vol. 16, p. 197-203 (2015)
 12. “Amino acid anions in organic ionic compounds. An ab initio study of selected ion pairs” di Benedetto Antonio, Bodo Enrico, Gontrani Lorenzo, Ballone Pietro, Caminiti Ruggero, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 118, p. 2471-2486, (2014)
 13. “The structural organization of N-methyl-2-pyrrolidone + water mixtures: A densitometry, x-ray diffraction, and molecular dynamics study” di Usula M, Mocci F, Cesare Marincola F, Porcedda S, Gontrani L, Caminiti R, *Journal of Chemical Physics*, vol. 140, p. 124503-1-124503-10 (2014).
 14. “FTIR spectra and density functional theory P.E.D. assignments of oxiranes in Ar matrix at 12 K” di L. Gontrani, S. Nunziante Cesaro, Stefano Stranges, Luigi Bencivenni, A. Pieretti, *Spectrochimica Acta A*, vol. 120, p. 558-567, (2014)
 15. “Liquid Structure of 1-Ethyl-3-methylimidazolium Alkyl Sulfates by X-ray Scattering and Molecular Dynamics” di Marina Macchiagodena, Fabio Ramondo, Alessandro Triolo, Lorenzo Gontrani, Ruggero Caminiti, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 116, p. 13448-13458 (2012)
 16. “Tautomerism in liquid 1,2,3-triazole: a combined energy-dispersive X-ray diffraction, molecular dynamics, and FTIR study.” di Bellagamba Marco, Bencivenni Luigi, Gontrani Lorenzo, Guidoni Leonardo, Sadun Claudia, *Structural Chemistry*, vol. 24, p. 933-943 (2013)
 17. Chloromethyl-oxirane and chloromethyl-thiirane in liquid phase: A joint experimental and quantum chemical study” di Campetella Marco, Bencivenni Luigi, Caminiti Ruggero, Zazza Costantino, Di Trapani Simone, Martino Antonio, Gontrani Lorenzo, *Chemical Physics*, vol. 473, p. 24-31 (2016)
 18. “An energy dispersive x-ray scattering and molecular dynamics study of liquid dimethyl carbonate” di Gontrani Lorenzo, Russina Olga, Cesare Marincola Flaminia, Caminiti Ruggero, *Journal of Chemical Physics*, vol. 131, p. 244503 (2010)
 19. “Liquid Structure of Trihexyltetradecylphosphonium Chloride at Ambient Temperature: An X-ray Scattering and Simulation Study” di Lorenzo Gontrani, Olga Russina, Fabrizio Lo Celso, Ruggero Caminiti, Gary Annat, Alessandro Triolo, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 113, p. 9235-9240 (2009)
 20. “A study of cyclohexane, piperidine and morpholine with X-ray diffraction and molecular simulations” di Gontrani Lorenzo, Ramondo Fabio, Caracciolo Giulio, Caminiti Ruggero.. *Journal of Molecular Liquids*, vol. 139, p. 23-28, (2008)
 21. “Glycine and alanine: a theoretical study of solvent effects upon energetics and molecular response properties” di Gontrani Lorenzo, Benedetta Mennucci, Jacopo Tomasi, *Journal of Molecular Structure: Theochem* 500 (1-3), 113-127 (2000)
 22. “Conformational Isomerisms and Nano-Aggregation in Substituted Alkylammonium Nitrates Ionic Liquids: an X-ray and Computational Study of 2-OMeEAN” di Campetella Marco, Gontrani Lorenzo, Bodo Enrico, Ceccacci Francesca, Cesare Marincola Flaminia, Caminiti Ruggero, *Journal of Chemical Physics*, vol. 138, p 184506 (2013)
 23. “Ionic conductivity and X-Ray structure study of an anhydrous and hydrated choline chloride and oxalic acid deep eutectic solvent” di Gontrani Lorenzo, Bonomo Matteo, Plechkova V. Natalia, Dini Danilo, Caminiti Ruggero, *Physical Chemistry Chemical Physics* 20, 30120-30124 (2018)
 24. “Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: an intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques “ di Campetella Marco, Mariani Alessandro, Sadun Claudia, Wu Boning, Castner Jr Edward W, Gontrani Lorenzo, *Journal of Chemical Physics* (2018), 148(13) 134507 (2018)



25. "Mesoscopic structural heterogeneities in Room-Temperature Ionic Liquids" di Russina Olga, Triolo Alessandro, Gontrani Lorenzo, Caminiti Ruggero. *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 3, p. 27-33, (2012)
26. "Coupled hydroxyl and ether functionalisation in EAN derivatives: the effect of hydrogen bond donor/acceptor groups on the structural heterogeneity studied with X-Ray diffractions and fixed charge/polarizable simulations" di Ramondo Fabio, Gontrani Lorenzo, Campetella Marco, *Physical Chemistry Chemical Physics* 21, 11464-11475 (2019)
27. "The structure of liquid N-methyl pyrrolidone probed by x-ray scattering and molecular simulations" di Gontrani Lorenzo, Caminiti Ruggero, *Journal of Chemical Physics*, vol. 136, 074505 (2012)
28. "Energy dispersive X-ray diffraction and molecular dynamics meet: The structure of liquid pyrrole." di Gontrani Lorenzo, Ramondo Fabio, Caminiti Ruggero, *Chemical Physics Letters*, vol. 417, p. 200-205 (2006)
29. "The Interpretation of Diffraction Patterns of Two Prototypical Protic Ionic Liquids: a Challenging Task for Classical Molecular Dynamics Simulations" di Gontrani Lorenzo, Bodo Enrico, Triolo Alessandro, Leonelli Francesca, D'Angelo Paola, Migliorati Valentina, Caminiti Ruggero, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 116, p. 13024-13032 (2012)
30. "Morphology and intermolecular dynamics of 1-alkyl-3-methylimidazolium bis{(trifluoromethane)sulfonyl}amide ionic liquids: structural and dynamic evidence of nanoscale segregation" Russina Olga, Triolo Alessandro, Gontrani Lorenzo, Caminiti Ruggero, Xiao Dong, Hines Larry G, Bartsch Richard A, Quitevis Edward L, Plechkova Natalia V, Seddon Ken R., *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 21 (42) (2009)

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE NON VALUTABILI

Non è valutabile, ai fini dei giudizi individuali e collegiali, in quanto non ancora accettata, la pubblicazione riportata nel CV al n. 86: Gontrani L, Plechkova NV, Bonomo M, In-Depth Physico-Chemical and Structural Investigation of Dicarboxylic Acid/Choline Chloride NaDES: a Spotlight on the Importance of a Rigorous Synthetic Procedure, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, in revisione

Non sono valutabili, inoltre, i contributi scientifici, elencati nel CV dal n. **87 al n.108**, presentati a congressi in quanto abstract in atti di convegno.

TESI DI DOTTORATO:

Il Candidato non allega la tesi di dottorato alla domanda, pertanto la Commissione non può esprimere un giudizio di merito su di essa, anche se, dal titolo "*Studio delle proprietà energetiche e molecolari di sistemi chimici di interesse biologico con metodi teorici-computazionali. Esempi di applicazioni di metodi teorici di vario tipo e sofisticazione allo studio di sistemi biologici di differente complessità*" si può evincere che i contenuti siano pienamente congruenti con le tematiche proprie del SSD CHIM/02 (Chimica Fisica).

MOTIVATO GIUDIZIO ANALITICO SUI TITOLI, SUL CURRICULUM E SULLA PRODUZIONE SCIENTIFICA IVI COMPRESA LA TESI DI DOTTORATO

GIUDIZI INDIVIDUALI:

Prof.ssa Angela Agostiano

Il candidato Goldrani evidenzia un curriculum molto ricco dal punto di vista delle attività scientifiche e buono da quello delle attività didattiche. Ha svolto periodi di ricerca sia in Italia che all'estero come assegnista, borsista o CoCoCo. Dimostra una notevole autonomia di ricerca, documentata dal fatto che è stato il principale investigatore in numerosi progetti finanziati e dal fatto che ha instaurato svariate collaborazioni personali sia in Italia che all'estero. La sua attività di ricerca è ricca, continuativa ed attinente al settore concorsuale 03/A2.

Si è svolta, sia dal punto di vista della ricerca pura che di quella applicata, avendo prevalentemente come oggetto i sali liquidi a temperatura ambiente ("liquidi ionici"), sviluppando sinergie tra metodi di calcolo e tecniche diffrattometriche come la diffrazione a raggi X in dispersione di energia (EDXD). Su questi temi ha scritto più di 80 pubblicazioni, e due libri, ed ha presentato numerose relazioni a congressi nazionali e internazionali, anche su invito. La sua attività didattica è buona e congruente con il settore disciplinare oggetto del concorso.

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa Angela Agostiano esprime parere più che positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica del Dott. Gontrani.

Prof. ssa Loredana Latterini

Il candidato dott. Gontrani, presenta un profilo curriculare di livello molto buono, sia dal punto di vista delle attività di ricerca che di didattica.

Ha svolto attività didattica regolarmente dal 2011 su ambiti sostanzialmente pertinenti con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02.

Ha svolto attività di ricerca principalmente in ambito accademico in Italia e per brevi periodi all'estero. Il candidato ha svolto attività di ricerca con continuità temporale dal 2002 ad oggi, occupandosi di diverse tematiche, tutte sostanzialmente pertinenti con le tematiche del Scientifico Disciplinare CHIM/02.

Ha partecipato a numerosi a progetti nazionali e internazionali e documenta una rete internazionale di collaborazioni.

Il candidato presenta per la valutazione 30 pubblicazioni scientifiche, che sono valutate mediante di livello molto buono per collocazione editoriale ed impatto sulla comunità scientifica di riferimento. Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni è mediamente molto buono per qualità e rigore metodologico e buono per innovatività; i contenuti scientifici sono giudicati coerenti con le tematiche del Settore Concorsuale 03/A2. Nei lavori in collaborazione il contributo individuale del candidato è molto buono, evidenziando una sostanziale autonomia di ricerca

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa Loredana Latterini esprime parere più che positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica del Dott. Gontrani.

Prof. Concetta De Stefano

Il candidato dott. Gontrani, presenta un ottimo profilo curriculare, dopo avere conseguito il titolo di dottore di ricerca in Scienze Chimiche, presso l'Università di Pisa, nel 2002, ha svolto attività di ricerca sia in ambito accademico, in Italia e all'estero, che presso la start-up Colosseum Combinatorial Chemistry Centre for Technology (C4T). L'attività didattica del candidato, buona nel complesso, è stata valutata congruente con le tematiche proprie del Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02. L'attività di ricerca, dal 2002 ad oggi, ha riguardato diverse tematiche tra cui: lo sviluppo di metodi di validazione delle simulazioni di Dinamica Molecolare, la stabilità termica, i processi di ordine/disordine e le cinetiche di trasformazione di fase in minerali ed equivalenti, di sintesi mediante diffrattometria RX su polveri: "solfati ed ossidi" e recentemente lo studio di liquidi ionici. Il candidato è stato titolare di numerosi assegni di ricerca e contratti. Ottima la partecipazione a progetti nazionali e internazionali. Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni è mediamente ottimo per qualità e rigore metodologico, buono per innovatività e per la rilevanza scientifica della collocazione editoriale. La coerenza delle pubblicazioni con le tematiche del Settore Concorsuale 03/A2 è complessivamente ottima ed il giudizio sui risultati ottenuti dal candidato in termini di impatto sulla comunità scientifica di riferimento è buono. Ottimo è il livello di partecipazione a progetti di ricerca, anche in qualità di responsabile scientifico e la sua attività di referee per qualificate riviste internazionali. La produzione scientifica, presentata dal candidato per la valutazione, svolta in collaborazione con colleghi di diverse università italiane e straniere, è caratterizzata da una buona continuità e un buon apporto personale. Il candidato ha presentato, in qualità di relatore, i risultati delle sue ricerche a congressi nazionali ed internazionali.

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa De Stefano esprime parere più che positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica del Dott. Gontrani.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Il candidato ha ottenuto il titolo di dottore di Ricerca in Scienze Chimiche, presso l'Università di Pisa, nel 2002 discutendo una 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". Sebbene il candidato non abbia presentato la tesi, l'ambito della ricerca può essere ritenuto congruente con il settore CHIM/02.

Dopo il dottorato, per quattro anni, ha svolto attività di ricerca presso la start-up Colosseum Combinatorial Chemistry Centre for Technology (C4T) – (Università di Roma Tor Vergata/ Tecnofarmaci S. C. p. A.

Nel 2006 ha continuato la sue ricerche, questa volta in ambito accademico, ottenendo una Borsa di studio, presso il CASPUR e successivamente svolgendo, presso l'Università di Cagliari, attività di ricerca nell'ambito dello sviluppo di metodi di validazione delle simulazioni di Dinamica Molecolare. Nel 2009, presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", si è interessato dello studio della stabilità termica, processi di ordine/disordine e cinetiche di trasformazione di fase in minerali ed equivalenti di sintesi mediante diffrazione RX su polveri: "solfati ed ossidi".

Dal 2010, prima presso il Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto di Struttura della materia (area della ricerca "Tor Vergata"), poi presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", ha svolto attività di ricerca nell'ambito dello studio dei liquidi ionici.

Dal 9 Aprile 2018 all'8 Aprile 2019, la sua ricerca ha riguardato lo studio teorico e sperimentale del legame alogeno in campioni liquidi, presso il Dipartimento "G. Ciamician" dell'Università di Bologna.

Il candidato dichiara inoltre di avere trascorso due brevi periodi all'estero, il primo nel giugno 2018 presso il Laboratorio QUILL, Queen's University of Belfast, Belfast (Irlanda del Nord, UK), il secondo nel dicembre 2009 presso il Laboratoire de Thermodynamique des Solutions et des Polymères - Université Blaise Pascal (Aubière-Clermont-Ferrand). L'attività didattica del candidato, congruente con le tematiche del SSD CHIM/02- Chimica Fisica, è stata svolta prevalentemente come attività didattica di supporto.

Il Dott. Gontrani è autore, in collaborazione anche con colleghi di altre università italiane e straniere, di n. 82 contributi scientifici pubblicati su riviste internazionali ISI e n. 22 comunicazioni a congressi nazionali ed internazionali. L'apporto individuale del candidato, in ogni pubblicazione presentata è stato ritenuto ottimo.

Il candidato ha partecipato a numerosi progetti di ricerca nazionali e internazionali.

Per quel che riguarda gli indicatori numerici (fonte Scopus) sull'attività di ricerca scientifica complessiva del candidato, riferiti alla data di scadenza dei termini delle candidature, essi risultano essere:

- a) numero medio di citazioni per pubblicazione: 22.51
- a) IF medio per pubblicazione 3.28 (calcolato considerando IF 2017 ed escludendo i lavori censiti Scopus ma senza IF)
- b) indice di Hirsch: 24

Il candidato, tuttavia, presenta per la valutazione solo n. 30 contributi scientifici su riviste ISI, i cui indicatori numerici dell'attività scientifica del candidato (fonte Scopus), riferiti alla data di scadenza dei termini delle candidature, essi risultano essere:

- a) numero medio di citazioni per pubblicazione: 33.9
- b) IF medio per pubblicazione 3.35 (calcolato considerando IF 2017)
- c) indice di Hirsch: 13

Il giudizio sui risultati ottenuti dalla valutazione dell'attività di ricerca complessiva, riportata sul CV, del candidato Dott. Gontrani in termini di impatto e continuità della sua attività scientifica è buono per impact factor medio, per il numero medio delle citazioni, per l'indice di Hirsch e per l'intensità e la continuità temporale della produzione scientifica. La produzione scientifica, valutata di ottima qualità, buona originalità, ottimo rigore metodologico e buona rilevanza scientifica della collocazione editoriale, risulta pienamente congruente con il SSD CHIM/02 – Chimica Fisica).

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, la Commissione, all'unanimità, esprime parere più che positivo sul curriculum vitae, i titoli e la produzione scientifica del candidato Dott. Lorenzo Gontrani e lo ritiene meritevole di essere ammesso alla discussione pubblica.

CANDIDATO

Dott.ssa LA GANGA Giuseppina

TITOLE CURRICULUM

TITOLI VALUTABILI

a) dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'Estero

La candidata dott.ssa La Ganga ha conseguito, in data 15/04/2013, il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche, presso l'Università degli Studi di Messina, discutendo una tesi dal titolo "*Artificial photosynthesis: a molecular approach to photo-induced water oxidation*", relatore Prof. Sebastiano Campagna.

b) eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero

La Candidata ha svolto la seguente attività didattica:

- AA 2008-2009 ha tenuto un incarico di esercitatore per l'insegnamento di Esercitazioni di Chimica Fisica II (SSD CHIM/02), Corso di Laurea in Chimica 75 ore;
- AA 2010-2011 ha svolto l'incarico di esercitatore per l'insegnamento Esercitazioni di Chimica Fisica I (SSD CHIM/02), Corso di Laurea in Chimica 75 ore;
- 2010-2011 ha svolto l'incarico di esercitatore per l'insegnamento/SSD CHIM/02 (Esercitazioni di Chimica Fisica I), Corso di Laurea in Chimica Industriale, Facoltà di Scienze MM.FF.NN. - n° 60 ore;
- AA 2013-2014 ha ricoperto l'incarico per l'insegnamento di "Celle per deposizione elettrochimica" per l'Obiettivo Formativo "*Formazione di tecnologi esperti nella progettazione e realizzazione di celle solari ed impianti di conversione e distribuzione dell'energia ad alta efficienza*" all'interno del progetto ENERGETIC, Dipartimento di Fisica e Scienze della Terra, Università degli Studi di Messina- n°25 ore di didattica frontale;
- AA 2013-2014 ha ricoperto l'incarico per l'insegnamento di "Materiali nano-strutturati e coloranti naturali per celle foto-elettrochimiche" per l'Obiettivo formativo "*Formazione di tecnologi esperti nella progettazione e realizzazione di celle solari ed impianti di conversione e distribuzione dell'energia ad alta efficienza*" all'interno del progetto ENERGETIC, Dipartimento di Fisica e Scienze della Terra, Università degli Studi di Messina- n°25 ore di didattica frontale.

c) documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri

La candidata presenta per la valutazione le seguenti attività:

- borsa di studio *post lauream* per attività di ricerca sulla tematica: "Nuovi sistemi cromoforo-catalizzatore per l'ossidazione fotochimica dell'acqua". Responsabile scientifico: Prof. Sebastiano Campagna. Durata della borsa: 3 mesi (aprile 2019 - giugno 2019 **2 mesi**) presso il Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche ed Ambientali dell'Università degli Studi di Messina;
- dicembre 2017- settembre 2018 (**10 mesi**) - borsa di studio *post lauream* per l'attività di ricerca sulla tematica Progettazione, preparazione e studio di sistemi auto-assemblati per fotosintesi artificiale". Responsabile scientifico: Prof. Sebastiano Campagna;
- febbraio - novembre 2017 (**10 mesi**) - borsa di studio *post lauream* nell'ambito del progetto FIRB_NANOSOLAR
- 01/02/2013 - 30/06/2016 (**36 mesi**, considerando il periodo di astensione obbligatoria per maternità) è stata titolare di un assegno a tempo determinato per lo svolgimento di attività di ricerca nel programma dal titolo: "*Sistemi molecolari integrati per la fotosintesi artificiale*". SSD CHIM/02.

d) organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi

La candidata ha partecipato ai seguenti progetti di ricerca:

- FIRB, NANOSOLAR (Protocollo RBAP11C58Y);
- MAECI, Italia-Giappone (Protocollo MAE0047175).

La candidata ha svolto attività di ricerca in collaborazione con numerosi ricercatori di Università italiane o straniere come si evince dai coautori delle pubblicazioni scientifiche (e dalla lista Scopus allegata alla domanda) quali: Dirk M. Guldi -Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg-

Germany; Maurizio Prato-Università di Trieste; Heinz Amenitsch - Institut für Anorganische chemie der Technischen Universität Graz Austria; Sigrid Bernstorff - ELETTRA Sincrotrone Trieste; Gianfranco Scorrano - Università di Padova; Carlo Bignozzi-Università di Ferrara; Antonino Licciardello -Università di Catania; Nicola Demitri - ELETTRA Sincrotrone Trieste; Mauro Carraro-Università di Padova; Stefano Caramori - Università di Ferrara; Claudio Chiorboli CNR Roma; Marco Cavazzini -CNR Roma; Andrea Sartorel - Università degli Studi di Padova; Zois Syrgiannis-Università degli Studi di Trieste; Philippe Lainé - Université Paris; Natali, Mirco - University of Ferrara; Amlan K. Pal- University of St Andrews UK; Marie Pierre Santoni -Université Paris; Philippe Ducharme - University of California; Samik Nag- University of Montreal; Max Burian- Technische Universität Graz; Grégory Dupeyre - Université Paris; Fabien Tuyères - Université Paris; Stefania Vitale - University College Dublin; Ludwig Chenneberg - Sorbonne Université; Andrea Volpe- CNR - Istituto per la Tecnologia delle Membrane -Rende; Erica Pizzolato- Università degli Studi di Padova; Giulia Volpato - Università degli Studi di Padova; Victor Brochery-Université de Montreal. Ha collaborato, inoltre, con numerosi colleghi dell'Università di Messina.

e) titolarità di brevetti relativamente ai settori concorsuali nei quali è prevista

La candidata non dichiara titolarità di brevetti.

f) relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali

La candidata è stata relatore ai seguenti congressi e convegni nazionali e internazionali:

1. Relatore alla XV edizione della Scuola Nazionale di Chimica Organometallica per Dottorandi Società Chimica Italiana - Divisione di Chimica Inorganica, Bertinoro, Italy - "Photo-induced water oxidation with tetra - nuclear ruthenium sensitizer and catalyst: A unique 4 x 4 ruthenium interplay triggering high efficiency with low-energy visible light", 23 – 27 maggio 2010;
2. Relatore al Convegno Nazionale di Fotochimica, Giardini Naxos, Italia - "Photoinduced water oxidation using a molecular cobalt catalyst", 10- 12 Giugno 2011;
3. Relatore al X Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare, Perugia, Italia - "Photoinduced water oxidation using a molecular cobalt catalyst", 25- 28 Settembre 2011;
4. Relatore al Convegno congiunto delle sezioni Sicilia e Calabria, SCI, Messina, Italia - "An efficient photoinduced water oxidation cycle based on a molecular cobalt catalyst", 1-2 Dicembre 2011;
5. Relatore **su invito** al XXV IUPAC Symposium on Photochemistry, Bordeaux, France - "Artificial Photosynthesis: a molecular approach to photo-induced water oxidation", 13-18 Luglio 2014.
6. Relatore all'IPM, Italian Photochemistry Meeting 2017 – Perugia, Italia – "New ruthenium based systems for photo-induced water oxidation", 14 – 16 Dicembre 2017.

g) premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca

La candidata è stata insignita dei seguenti premi e riconoscimenti:

1. EPA Prize for the best PhD thesis in Photochemistry 2014;
2. Articolo selezionato per la copertina del fascicolo FARADAY DISCUSSIONS, vol. 155, p. 177-190, ISSN: 1364-5498, (P06 in elenco delle pubblicazioni).
3. La pubblicazione "Artificial photosynthesis: a molecular approach to photo-induced water oxidation. Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero. *Pure and Applied Chemistry*, **2015**, 87(6), 583-599", è stata prodotta su invito per la rivista *Pure and Applied Chemistry*.

TITOLI NON VALUTABILI

I titoli sottoelencati e presentati dalla candidata dott.ssa Giuseppina La Ganga non sono valutabili secondo i criteri stabiliti dalla commissione durante la prima riunione e pubblicati nel verbale n. 1 del 31 Luglio 2019.

1. Abilitazione all'esercizio della professione di chimico conseguito, presso l'Università degli Studi di Messina nel novembre 2009

2. Laurea magistrale in Chimica (Classe LM54) presso l'Università degli Studi di Messina con la votazione di 110/110 e lode
3. Laurea triennale in Chimica presso l'Università degli Studi di Messina con la votazione di 110/110 e lode.
4. Diploma di maturità scientifica presso il Liceo Scientifico "Galileo Galilei", Spadafora (ME) con votazione 100/100.
5. Attività di Tutor di numerosi studenti del corso di laurea in Chimica Triennale e Magistrale durante il loro periodo di tirocinio e tesi.
6. Abilitazione Scientifica Nazionale per la II fascia nel settore concorsuale 03/A2 (Modelli e metodologie per le scienze chimiche), Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/02, conseguito il 5/04/2018.
7. Abilitazione Scientifica Nazionale per la II fascia nel settore concorsuale 03/B1 (Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici), Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/03, conseguita il 4/04/2018.
8. Abilitazione Scientifica Nazionale per la II fascia nel settore concorsuale 03/B2 (Fondamenti chimici delle tecnologie), Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/07, conseguita il 3/04/2018.
9. Attestazione della conoscenza della lingua inglese: Graded Examination in Spoken English, Grade 6, Trinity College London.
10. Partecipazione nel 2006 al Corso di Sicurezza negli Ambienti di Lavoro presso l'Università degli Studi di Messina;
11. Partecipazione alla "IV Scuola di Fotochimica" a Bologna, settembre 2007.
12. Partecipazione alla "XV edizione della Scuola Nazionale di Chimica, Organometallica per dottorandi" a Bertinoro maggio 2010.
13. Attività di referee per riviste della ACS e della Wiley, tra cui *The Journal of Physical Chemistry, Chemistry – A European Journal e Langmuir*;
14. È co-autore dell'articolo "Un approccio supramolecolare alla fotosintesi artificiale" pubblicato sulla rivista *La Chimica e l'Industria*, luglio/agosto 2014, n°4, p. 24-28, sez. Chimica & Fotochimica.
15. Membro del comitato organizzatore del Convegno Nazionale di Fotochimica, Giardini Naxos, Italia dal 10-06-2011 al 12-06-2011;
16. Membro del comitato organizzatore del UK-IT Joint Meeting on Photochemistry 2019.
17. È autore principale dell'articolo "A novel, alternative method for quantitative detection of photogenerated molecular oxygen in photoinduced water oxidation" pubblicato in EPA Newsletter – Technical Note – novembre 2013, p. 105 – 112, ISSN 1011-4246.
18. AA 2014-2015 è stata tutor di stage (n°109 ore) per il progetto PON "ENERGETIC" (Codice identificativo progetto: PON02_00355_3391233/F1).

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE VALUTABILI

- P1. Synthesis, characterization, absorption spectra, and luminescence properties of multinuclear species made of Ru(II) and Ir(III) chromophores.** Marco Cavazzini, Silvio Quici, Chiara Scalera, Fausto Puntoriero, Giuseppina La Ganga, Sebastiano Campagna. *Inorganic Chemistry*, **2009**, 48 (17), 8578–8592, DOI: 10.1021/ic9006108.
- P2. Photoinduced water oxidation sensitized by a tetranuclear Ru(II) dendrimer.** Giuseppina La Ganga, Francesco Nastasi, Sebastiano Campagna, Fausto Puntoriero. *Dalton Transaction*, **2009**, 45, 9997–9999 DOI: 10.1039/b907257h.
- P3. Photo-induced water oxidation with tetra-nuclear ruthenium sensitizer and catalyst: A unique 4 x 4 ruthenium interplay triggering high efficiency with low-energy visible light.** Fausto Puntoriero, Giuseppina La Ganga, Andrea Sartorel, Mauro Carraro, Gianfranco Scorrano, Marcella Bonchio, Sebastiano Campagna. *Chemical Communication*, **2010**, 46 (26), 4725–4727 DOI: 10.1039/c0cc00444h.
- P4. Changing the role of 2,2'-bipyridine from secondary ligand to protagonist in [Ru(bpy)2(NN)]2+ complexes: Low energy, red emission from a Ru(II)-to-2,2'-bipyridine 3MLCT state.** Samik Nag, Janaina G. Ferreira, Ludwig Chenneberg, Philippe Dauphin Ducharme, Garry S. Hanan, Giuseppina La

- Ganga, Scolastica Serroni, Sebastiano Campagna. *Inorganic Chemistry*, **2010**, *50* (1), 7–9, DOI: 10.1021/ic101986.
- P5. Photoinduced water oxidation using dendrimeric Ru(II) complexes as photosensitizers.** Fausto Puntoriero, Andrea Sartorel, Michele Orlandi, Giuseppina La Ganga, Scolastica Serroni, Marcella Bonchio, Franco Scandola, Sebastiano Campagna. *Coordination Chemistry Reviews*, **2011**, *255* (21-22), 2594-2601 DOI: 10.1016/j.ccr.2011.01.026.
- P6. Light-driven water oxidation with a molecular tetra-cobalt(III) cubane cluster.** Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero, Sebastiano Campagna, Irene Bazzan, Serena Berardi, Marcella Bonchio, Andrea Sartorel, Mirco Natali, Franco Scandola. *Faraday Discussion*, **2012**, *155*, 177-190, DOI: 10.1039/c1fd00093d.
- P7. Photocatalytic Water Oxidation: Tuning Light-Induced Electron Transfer by Molecular. Co₄O₄ Cores.** Serena Berardi, Giuseppina La Ganga, Mirco Natali, Irene Bazzan, Fausto Puntoriero, Andrea Sartorel, Franco Scandola, Sebastiano Campagna, Marcella Bonchio. *Journal of American Chemical Society*, **2012**, *134* (27), 11104-11107, DOI: 10.1021/ja303951z.
- P8. Photo-induced water oxidation: New photocatalytic processes and materials.** Serena Berardi, Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero, Andrea Sartorel, Sebastiano Campagna, Marcella Bonchio. *Photochemistry*, **2012**, *40*, 274-294, DOI:10.1039/9781849734882-00274.
- P9. Red-Emitting [Ru(bpy) (N-N)]²⁺ Photosensitizers: Emission from a Ruthenium(II) to 2,2'-Bipyridine 3MLCT State in the Presence of Neutral Ancillary "Super Donor" Ligands** Amlan K. Pal, Samik Nag, Janaina G. Ferreira, Victor Brochery, Giuseppina La Ganga, Antonio Santoro, Scolastica Serroni, Sebastiano Campagna, Garry S. Hanan. *Inorganic Chemistry*, **2014**, *53* (3), 1679–1689. DOI: 10.1021/ic4028332.
- P10. The use of a vanadium species as a catalyst in photoinduced water oxidation.** Marie-Pierre Santoni, Giuseppina La Ganga, Viviana Mollica Nardo, Mirco Natali, Fausto Puntoriero, Franco Scandola, Sebastiano Campagna. *Journal of American Chemical Society*, **2014**, *136* (23), 8189–8192. DOI: 10.1021/ja5040182.
- P11. A functionalized, ethynyl-decorated, tetracobalt(III) cubane molecular catalyst for photoinduced water oxidation.** Giuseppina La Ganga, Viviana Mollica Nardo, Massimiliano Cordaro, Mirco Natali, Stefania Vitale, Antonino Licciardello, Francesco Nastasi, Franco Scandola, Sebastiano Campagna. *Dalton Transaction*, **2014**, *43* (40), 14926-14930. DOI: 10.1039/c4dt01785d.
- P12. Artificial photosynthesis: a molecular approach to photo-induced water oxidation.** Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero. *Pure and Applied Chemistry*, **2015**, *87*(6), 583-599. DOI: 10.1515/pac-2014-1106
- P13. Working the other way around: photocatalytic water oxidation triggered by reductive quenching of the photoexcited chromophore.** Mirco Natali, Fausto Puntoriero, Claudio Chiorboli, Giuseppina La Ganga, Andrea Sartorel, Marcella Bonchio, Sebastiano Campagna, Franco Scandola. *Journal of Physical Chemistry C*, **2015**, *119* (5), 2371-2379. DOI: 10.1021/jp512541s.
- P14. Water oxidation catalysis upon evolution of molecular Co(III) cubanes in aqueous media.** Andrea Sartorel, Andrea Genoni, Giuseppina La Ganga, Andrea Volpe, Fausto Puntoriero, Marilena Di Valentin, Marcella Bonchio, Mirco Natali. *Faraday Discussion*, **2015**, *185*, 121-141. DOI: 10.1039/C5FD00076A
- P15. Photophysics of transition metal complexes.** Maria Letizia Di Pietro, Francesco Nastasi, Emanuela Trovato, Antonino Arrigo, Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero. *Photochemistry*, **2016**, *43*, 148-172. DOI: 10.1039/9781782622772-00148
- P16. Ruthenium based photosensitizer/catalyst supramolecular architectures in light driven water oxidation.** Max Burian, Zois Syrgiannis, Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero, Mirco Natali, Franco Scandola, Sebastiano Campagna, Maurizio Prato, Marcella Bonchio, Heinz Amenitsch, Andrea Sartorel. *Inorganica Chimica Acta*, **2017**, *454*, 171-175. DOI: 10.1016/j.ica.2016.04.010
- P17. Artificial, molecular-based light-harvesting antenna systems made of metal dendrimers and multibodipy species.** Antonino Arrigo, Giuseppina La Ganga, Francesco Nastasi, Scolastica Serroni, Antonio Santoro, Marie Pierre Santoni, Maurilio Galletta, Sebastiano Campagna, Fausto Puntoriero. *Comptes Rendus Chimie*, **2017**, 209-220, DOI: 10.1016/j.crci.2016.02.011.
- P18. Solvent-control of photoinduced electron transfer via hydrogen bonding in a molecular triad made of dinuclear chromophore subunit.** Antonino Arrigo, Francesco Nastasi, Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero, Gabriella Zappalà, Antonino Licciardello, Marco Cavazzini, Silvio Quici, Sebastiano Campagna. *Chemical Physics Letters*, **2017**, 1-9, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.02.035.

- P19. Multichromophoric hybrid species made of perylene bisimide derivatives and Ru(II). and Os(II) polypyridine subunits.** Francesco Nastasi, Giuseppina La Ganga, Sebastiano, Zois Syrgiannis, Francesco Rigodanza, Stefania Vitale, Antonino Licciardello, Maurizio Prato. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2017**, 14055-14065, DOI: 10.1039/C7CP01597F.
- P20. Aggregation induced energy transfer in a decanuclear Os(II)/Ru(II) polypyridine lightharvesting antenna dendrimer.** Antonino Arrigo, Fausto Puntoriero, Giuseppina La Ganga, Sebastiano Campagna, Max Burian, Heinz Amenitsch. *Chem*, **2017**, 494-508, DOI: 10.1016/j.chempr.2017.06.002.
- P21. Photo and redox active metal dendrimers: a journey from molecular design to application and self-aggregated systems.** Fausto Puntoriero, Scolastica Serroni, Giuseppina La Ganga, Antonio Santoro, Maurilio Galletta, Francesco Nastasi, Emanuele La Mazza, Ambra Maria Cancelliere, and Sebastiano Campagna. *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2018**, 3887-3889, DOI: 10.1002/ejic.201800507
- P22. Carbohydrates and charges on OPEs: toward the design of cancer bullets.** Aurora Mancuso, Anna Barattucci, Paola Bonaccorsi, Antonino Giannetto, Giuseppina La Ganga, Maria Musarra-Pizzo, Tania Maria Grazia Salerno, Antonio Santoro, Maria Teresa Sciortino, Fausto Puntoriero, Maria Letizia Di Pietro. *Chemistry- A European Journal*, **2018**, 16972-16976, DOI: 10.1002/chem.201803804
- P23. Hierarchical Organization of Perylene-Bisimides and Polyoxometalates for Photoassisted Water Oxidation.** Marcella Bonchio, , Zois Syrgiannis, Max Burian, Nadia Marino, Erica Pizzolato, Konstantin Dirian, Francesco Rigodanza, Giulia Alice Volpato, Giuseppina La Ganga, Nicola Demitri, Serena Berardi, Heinz Amenitsch, Dirk M. Guldi, Stefano Caramori, Carlo Alberto Bignozzi, Andrea Sartorel, and Maurizio Prato. *Nature Chemistry*, **2019**, 146-153, DOI: 10.1038/s41557-018-0172-y.
- P24. Photoinduced intercomponent processes in selectively addressable bichromophoric dyads made of linearly arranged Ru(II) terpyridine and expanded pyridinium components.** Fausto Puntoriero, Antonino Arrigo, Antonio Santoro, Giuseppina La Ganga, Fabien Tuyieras, S. Campagna, Gregory Dupeyre, Philippe P. Lainé. *Inorganic Chemistry*, **2019**, 5807-5817, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b00139.

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE NON VALUTABILI

Non sono valutabili, poiché non ISI le seguenti due pubblicazioni:

- P25. Un approccio supramolecolare alla fotosintesi artificiale Francesco Nastasi, Fausto Puntoriero, Giuseppina La Ganga, Marie Pierre Santoni, Scolastica Serroni, Maurilio Galletta, Sebastiano Campagna. *La Chimica e l'Industria*, luglio/agosto 2014, n°4, p. 24-28, sez. Chimica & Fotochimica.
- P26. A novel, alternative method for quantitative detection of photogenerated molecular oxygen in photoinduced water oxidation. Giuseppina La Ganga, Fausto Puntoriero. Technical note in EPA Newsletter, November **2013**, p.105-112. ISSN 1011-4246.

Non sono valutabili tutti i contributi scientifici presentati a congressi (in elenco nel CV presentato dalla candidata) in quanto abstract in atti di congresso.

TESI DI DOTTORATO

La Candidata allega la tesi di dottorato “*Artificial photosynthesis: a molecular approach to photo-induced water oxidation*”, relatore Prof. Sebastiano Campagna. I contenuti della tesi, pienamente congruenti con le tematiche proprie del SC 03/A2 e del SSD CHIM/02 (Chimica Fisica), riguardano lo studio di nuovi sistemi molecolari e supramolecolari per la fotoossidazione dell’acqua ad ossigeno molecolare. I risultati ottenuti, riassunti nella tesi sono innovativi e di ottimo livello scientifico, come anche testimoniato dal premio internazionale “EPA Prize “ per la miglior tesi di dottorato di cui è stata insignita.

MOTIVATO GIUDIZIO ANALITICO SUI TITOLI, SUL CURRICULUM E SULLA PRODUZIONE SCIENTIFICA IVI COMPRESA LA TESI DI DOTTORATO

GIUDIZI INDIVIDUALI:

Prof.ssa Angela Agostiano

La candidata Giuseppina La Ganga evidenzia un ottimo curriculum sia dal punto di vista delle attività scientifiche che da quello delle attività didattiche. Ha svolto periodi di ricerca sia in Italia che all'estero. Ha partecipato a numerosi progetti di ricerca finanziati nazionali e internazionali, in collaborazione con prestigiosi gruppi di ricerca anche stranieri. La sua attività di ricerca è ottima, pubblicata su riviste internazionali di buon e a volte ottimo impatto, molto continuativa ed attinente al settore concorsuale 03/A2. Ha partecipato a numerose conferenze nazionali e internazionali, anche su invito. La sua attività di ricerca si è svolta prevalentemente nel campo della fotochimica molecolare, ed ha riguardato la progettazione e realizzazione di sistemi fotosintetici artificiali da utilizzare nel campo della conversione fotochimica dell'energia, caratterizzati con svariate tecniche spettroscopiche ed elettrochimiche. Per il suo lavoro durante la tesi di dottorato ha ricevuto anche un prestigioso premio. La sua attività didattica è ottima e tutta congruente con il settore disciplinare oggetto del concorso.

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa Angela Agostiano esprime parere molto positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica della Dott.ssa Giuseppina La Ganga.

Prof.ssa Loredana Latterini

La candidata dott.ssa Giuseppina La Ganga, presenta un profilo curriculare di livello molto buono, sia dal punto di vista delle attività di ricerca che di didattica.

Ha svolto attività didattica dal 2008 su ambiti pertinenti con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02.

Ha svolto attività di ricerca in ambito accademico con continuità temporale dal 2009 ad oggi, occupandosi di tematiche coerenti con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02.

Ha partecipato a numerosi a progetti nazionali e internazionali e documenta una cospicua rete internazionale di collaborazioni.

La candidata presenta per la valutazione 24 pubblicazioni scientifiche, che sono valutate mediante di livello molto buono per collocazione editoriale ed impatto sulla comunità scientifica di riferimento. Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni è mediamente molto buono per qualità e rigore metodologico e buono per innovatività; i contenuti scientifici sono giudicati coerenti con le tematiche del Settore Concorsuale 03/A2. Nei lavori in collaborazione il contributo individuale della candidata è buono, evidenziando una sufficiente autonomia di ricerca

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa Loredana Latterini esprime parere più che positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica della dott.ssa Giuseppina La Ganga.

Prof.ssa Concetta De Stefano

La candidata dott.ssa Giuseppina La Ganga presenta un ottimo profilo curriculare, ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca "Scienze Chimiche" nel 2013 presso l'Università degli Studi di Messina. Dopo il periodo di dottorato ha continuato la sua attività di ricerca nel campo della fotocatalisi in soluzione presso l'Università di Messina ed è stata titolare, dal 2013 ad oggi, di assegni e borse di ricerca. L'attività didattica della candidata svolta, sia come attività di supporto per i corsi di Esercitazioni di Chimica Fisica I e II che come titolare di corsi di formazione all'interno del progetto ENERGETIC, risulta ampia, di buon livello ed è coerente con le discipline del SSD CHIM/02. La produzione scientifica presentata dalla candidata per la valutazione, svolta in collaborazione con numerosi colleghi di diverse università italiane e straniere, consiste di n. 24 pubblicazioni ISI e n. 2 non ISI, ed è caratterizzata da una ottima continuità con un buon apporto personale. La dott.ssa La Ganga ha partecipato a progetti di ricerca sia nazionali che internazionali. E' stata relatore a diversi convegni, nazionali e internazionali, anche su invito. Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni è ottimo per qualità, per rigore metodologico, per innovatività e per la rilevanza scientifica della collocazione editoriale. La coerenza delle pubblicazioni con le tematiche del Settore Concorsuale 03/A2 e del SSD CHIM/02-Chimica Fisica è ottima, così come l'impatto sulla comunità scientifica di riferimento. Buona è la sua attività di referee

per qualificate riviste internazionali. La dott.ssa La Ganga ha ricevuto importanti premi e riconoscimenti per la sua attività di ricerca, tra cui il premio EPA Prize per la miglior tesi di dottorato. In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa De Stefano esprime parere pienamente positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica della candidata Dott.ssa Giuseppina La Ganga.

GIUDIZIO COLLEGIALE

Il curriculum vitae del dott.ssa Giuseppina La Ganga è collegialmente giudicato molto positivamente dai componenti della Commissione. La candidata, nel 2013 ha conseguito il titolo di dottore di ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Messina, discutendo una tesi dal titolo: "*Artificial photosynthesis: a molecular approach to photo-induced water oxidation*". I contenuti della tesi, innovativi e di ottimo livello scientifico, come anche testimoniato dal premio internazionale di cui è stata insignita, risultano pienamente congruenti con le tematiche proprie del SC 03/A2 e del SSD CHIM/02 (Chimica Fisica). L'attività didattica, svolta in ambito Universitario sia come attività di supporto che come titolare di corsi di formazione (progetto ENERGETIC), risulta ampia e coerente con i contenuti del SSD CHIM/02.

Come si evince dal curriculum e dalle pubblicazioni allegate, la ricerca della dott.ssa La Ganga si colloca nell'ambito della fotochimica supramolecolare con particolare attenzione alla conversione fotochimica dell'energia solare ed in particolare all'ossidazione dell'acqua ad ossigeno molecolare. Dopo il corso di dottorato, la Dott.ssa La Ganga ha usufruito di un assegno di ricerca per lo svolgimento di attività di ricerca nel programma dal titolo: "*Sistemi molecolari integrati per la fotosintesi artificiale*", continuando ad operare nell'ambito della fotocatalisi in soluzione. Progetto di ricerca che, ha continuato ad investigare negli anni a venire fino ad oggi usufruendo di borse di studio, nell'ambito di progetti nazionali quali il FIRB Nanosolar ed internazionali quali un progetto bilaterale (MAECI) Italia Giappone.

I lavori a stampa allegati alla domanda, sono in molti casi di altissimo impatto scientifico e sono stati pubblicati su riviste prettamente coerenti con l'SSD CHIM/02 o di Chimica multidisciplinare. Di rilievo tra le pubblicazioni presentate gli articoli pubblicati su Nature Chemistry e CHEM. La candidata, nel 2014, ha ricevuto il premio come miglior tesi di dottorato in fotochimica dalla European Photochemistry Association (EPA). Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni presentate dalla candidata è ottimo per originalità, eccellente per innovatività, ottimo per rigore metodologico e per la rilevanza scientifica della collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. La Dott.ssa La Ganga è autrice, in collaborazione anche con colleghi di altre università italiane e straniere, di n. 24 contributi scientifici pubblicati su riviste internazionali ISI, n. 2 articoli non ISI, n. 19 comunicazioni a congressi nazionali e internazionali. Ottimo risulta l'apporto individuale della candidata in ogni pubblicazione presentata. Ha partecipato a numerosi congressi nazionali ed internazionali, tenendo in particolare una *invited lecture* allo XXV IUPAC Symposium on Photochemistry.

Per quel che riguarda gli indicatori numerici dell'attività scientifica della candidata (fonte Scopus), riferiti alla data di scadenza dei termini delle candidature, essi risultano essere:

- b) numero medio di citazioni per pubblicazione: 28.91
- c) IF medio per pubblicazione: 6.81 (calcolato considerando IF 2017 ed escludendo i lavori censiti scopus ma senza IF)
- d) indice di Hirsch: 12

Il giudizio sui risultati ottenuti dalla candidata in termini di impatto e continuità della sua attività scientifica è eccellente per impact factor medio, per il numero medio delle citazioni, ottimo per l'indice di Hirsch e per l'intensità e la continuità temporale della produzione scientifica. La Commissione giudica l'attività di ricerca scientifica della candidata Dott.ssa La Ganga, anche sulla base degli indicatori numerici sopra citati e sulla base dei dati sull'attività scientifica, di ottima rilevanza internazionale.

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, la Commissione, all'unanimità, esprime parere ampiamente positivo sul curriculum vitae, i titoli e la produzione scientifica della candidata Dott.ssa Giuseppina La Ganga e la ritiene pienamente meritevole di essere ammessa alla discussione pubblica.



CANDIDATO

Dott. MUNAO' Gianmarco

TITOLIE CURRICULUM

TITOLI VALUTABILI

a) dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'Estero

Il candidato dott. Gianmarco Munaò ha conseguito in data 06/03/2009 il titolo di Dottore di Ricerca in Fisica, discutendo una tesi dal titolo "Improvements of RISM theory in molecular liquids investigations", relatore Prof. Carlo Caccamo (Dipartimento di Fisica - Università degli Studi di Messina)

b) eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero

Il Candidato non presenta attività didattica valutabile secondo i criteri stabiliti dalla commissione durante la prima riunione e pubblicati nel verbale n. 1 del 31 Luglio 2019.

c) documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri

Il candidato presenta per la valutazione le seguenti attività di formazione o ricerca:

- 15 Gennaio- 15 Maggio 2011 (4 mesi) di una borsa di studio per attività di ricerca nell'ambito del programma di ricerca "Equazioni integrali per fluidi tetraedrici" nel gruppo del prof. Francesco Sciortino presso Sapienza, Università di Roma.
- 01 Dicembre 2011- 30 Novembre 2013 (24 mesi): Assegnista di ricerca nel gruppo del prof. Francesco Sciortino, Sapienza, Università di Roma, nell'ambito del progetto ERC "Patchy colloidal particles: a powerful arsenal for the fabrication of tomorrow new super-molecules. A theoretical and numerical study of their assembly processes".
- 01 Dicembre 2013 - 31 Maggio 2015 (18 mesi): Assegnista di ricerca nel gruppo del prof. Carlo Caccamo, Università di Messina, nell'ambito del progetto PRIN MIUR 2010-2011 "Build with DNA: a theoretical, simulation and experimental approach".
- 01 Giugno 2015-01 Dicembre 2015 (6 mesi): Titolare di contratto di lavoro autonomo occasionale per attività di ricerca nell'ambito del programma di ricerca "Sviluppo di codici numerici FORTRAN idonei alla risoluzione di equazioni integrali, e alla simulazione al computer, della struttura di fluidi molecolari" nel gruppo del prof. Carlo Caccamo presso l'Università di Messina.
- 01 Marzo 2016-01 Agosto 2016 (5 mesi): Titolare di borsa di studio per attività di ricerca nell'ambito del programma di ricerca "Sviluppo di codici numerici FORTRAN di simulazione al computer di processi di auto-aggregazione di particelle colloidali risultanti nella formazione di strutture cave atte all'incapsulamento di proteine e altre macromolecole" nel gruppo del prof. Carlo Caccamo presso l'Università di Messina.
- 02 Maggio 2017-30 Aprile 2018 (12 mesi): Assegnista di ricerca nel gruppo del prof. Giuseppe Milano, Università di Salerno, nell'ambito del progetto PRIN MIUR 2015-2016 "Molecular Organization in Organic Thin Films via Computer Simulation of their Fabrication Processes".
- 02 Maggio 2018-30 Aprile 2019 (12 mesi): Assegnista di ricerca nel gruppo del prof. Giuseppe Milano, Università di Salerno, nell'ambito del progetto ERC "Intelligent bulk MATerials for Smart TRAnsport industries (MASTRO)".

d) organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi

Il dott. Munaò è stato Principal Investigator di un grant di 465000 ore di calcolo al CINECA/ISCRA Super Computing Application and Innovation Department con un progetto dal titolo " Modeling of Nano CComposites - 17/11/2017 - 17/08/2018.

Il Candidato ha al suo attivo le seguenti partecipazioni ad attività di ricerca di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, come si evince dalle pubblicazioni riportate nel CV:

- gruppo di ricerca del prof. Francesco Sciortino, Sapienza, Università di Roma, nell'ambito del progetto ERC "Patchy colloidal particles: a powerful arsenal for the fabrication of tomorrow new super-molecules. A theoretical and numerical study of their assembly processes". Collaborazioni con

i dottori Teun Vissers, Frank Smalenburg e Zdenek Preisler, Sapienza, Università di Roma; con il prof. Achille Giacometti, Università Ca' Foscari, Venezia; con i dottori Patrick O'Toole e Toby Hudson, Università di Sidney. I principali risultati della ricerca sono riportati nelle pubblicazioni scientifiche dal 2011 al 2013.

- gruppo di ricerca del prof. Carlo Caccamo, Università di Messina, nell'ambito del progetto PRIN MIUR 2010-2011 "Build with DNA: a theoretical, simulation and experimental approach". Collaborazioni con il dott. Dino Costa e il prof. Santi Prestipino, Università di Messina; con il dott. Franz Saija, CNR-IPCF, Messina; con il prof. Francesco Sciortino e i dottori Teun Vissers, Frank Smalenburg e Zdenek Preisler, Sapienza, Università di Roma; con il prof. Achille Giacometti, Università Ca' Foscari, Venezia; con i dottori Patrick O'Toole e Toby Hudson, Università di Sidney; con il prof. Tomaz Urbic e il dott. Matej Hus, Università di Ljubljana; con il dott. Francisco Gámez, Spanish National Research Council, Madrid. I principali risultati della ricerca sono riportati nelle pubblicazioni scientifiche dal 2014 al 2015.
- gruppo di ricerca del prof. Giuseppe Milano, Università di Salerno, nell'ambito del progetto PRIN MIUR 2015-2016 "Molecular Organization in Organic Thin Films via Computer Simulation of their Fabrication Processes". Collaborazioni con il dott. Antonio Pizzirusso, Università di Salerno; con la dott.ssa Andrea Correa, Università di Napoli "Federico II"; con il prof. Florian Mueller-Plathe, Università di Darmstadt; con il dott. Antonio De Nicola, Università di Yamagata; con il prof. Toshihiro Kawakatsu, Università di Tohoku, Sendai. I principali risultati della ricerca sono riportati nelle pubblicazioni scientifiche dell'anno 2018.

e) titolarità di brevetti relativamente ai settori concorsuali nei quali è prevista

Il Candidato dott. Munaò non dichiara titolarità di brevetti.

f) relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali

Il dott. Munaò è stato relatore ai seguenti congressi e convegni nazionali e internazionali:

- Relatore **su invito** alla conferenza "Sesta giornata con la Fisica Teorica a Messina", Messina. Titolo del talk: "Processi di aggregazione in sistemi colloidali con interazioni fortemente direzionali", 16-05-2012.
- Relatore **su invito** alla conferenza "Ottava Giornata con la Fisica Teorica a Messina", Messina. Titolo del talk: "Dimeri colloidali con interazioni antagoniste: come il processo di self-assembly compete con la separazione di fase", 22 Maggio 2014.
- Relatore **su invito** alla conferenza "Soft interactions in bio-nanostructures", Roccalumera (ME). Titolo del talk: "Modelling self-assembly of patchy and Janus colloids into micelles, tubes and bilayers", 23 Luglio 2015.
- Relatore alla conferenza "Italian Soft Days, 2° Edition", Milano. Titolo del talk: "Encapsulation of spherical nanoparticles by colloidal dimers", 23-24 Giugno 2016.
- Relatore alla conferenza "30° Conference on the European Colloid and Interface Society", Sapienza Università di Roma. Titolo del talk: "Self-assembly of colloidal dimers around spherical nanoparticles: a simple model for encapsulation", 4 - 9 Settembre 2016.
- Relatore alla conferenza "Materials.it 2016", Catania. Titolo del talk: "Self-assembled bio-nanostructures from Janus dimers", 12-15 dicembre 2016.
- Relatore alla conferenza "Materials.it 2016", Catania. Titolo del talk: "Density and structural anomalies in soft-repulsive dimeric fluids", 12- 15 Dicembre 2016.
- Relatore alla conferenza "Fismat 2017", ICTP-SISSA, Trieste. Titolo del talk: "Hybrid particle-field molecular dynamics study of Silica-Polystyrene nanocomposites", 1 - 5 Ottobre 2017
- Relatore alla conferenza "Materials.it 2018", CNR-ISMN, Bologna. Titolo del talk: "Molecular structure and multi-body interactions in polymer nanocomposites", 22- 26 Ottobre 2018.

g) premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca

Il candidato non dichiara di essere stato insignito di premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca. Purtroppo dal CV risulta che il dott. Munaò ha ottenuto i seguenti riconoscimenti:

- G. Munaò, A. Pizzirusso, A. Kalogirou, A. De Nicola, T. Kawakatsu, F. Mueller-Plathe and G. Milano, "Molecular structure and multi-body potential of mean force in silica-polystyrene nanocomposites", *Nanoscale* **10**, 21656 (2018). *Featured on the back cover.*
- S. Prestipino, G. Munaò, D. Costa, G. Pellicane and C. Caccamo, "Two-dimensional mixture of amphiphilic dimers and spheres: Self-assembly behaviour", *J. Chem. Phys.* **147**, 144902 (2017). *Selected as a 2017 Editors' Choice article.*
- G. Munaò, P. O'Toole, T. S. Hudson, D. Costa, C. Caccamo, F. Sciortino and A. Giacometti, "Cluster formation and phase separation in heteronuclear Janus dumbbells", *J. Phys. Cond. Matt.*, **27**, 234101 (2015). *Selected for inclusion in the IOP Select 2015.*

TITOLI NON VALUTABILI

I titoli sottoelencati e presentati dal candidato dott. Gianmarco Munaò non sono valutabili secondo i criteri stabiliti dalla commissione durante la prima riunione e pubblicati nel verbale n. 1 del 31 Luglio 2019.

1. Laurea con lode in Fisica, Università degli Studi di Messina. Titolo della tesi: "Studio teorico e simulativo di proprietà strutturali di miscele di liquidi molecolari".
2. Attività didattica di supporto ai corsi di "Fisica dei liquidi" e "Fisica computazionale" negli A.A. 2012/2013 presso l'università di Roma "La Sapienza". L'attività didattica presentata dal dott. Gianmarco Munaò non è valutabile, in quanto il candidato non dichiara il numero di ore svolte nei corsi.
3. Membro della commissione di esami per il corso di "Fisica della materia", presso Sapienza, Università di Roma durante l'a.a. 2012/2013.
4. Attività di supervisione di studenti per gli esami del corso di "Fisica computazionale" presso l'Università di Roma "La Sapienza" durante l'a.a. 2012/2013.
5. Attività di supervisione di studenti durante la preparazione della Tesi di Laurea Magistrale in Fisica presso l'Università degli Studi di Messina, a.a. 2015/2016.
6. Attività di Referee per le seguenti riviste scientifiche: *Soft Matter*, *Physical Chemistry and Chemical Physics*, *RSC Advances*, *Advanced materials*, *European Physical Journal E*, *Molecular Systems Design & Engineering*, *Langmuir*, *Journal of Physical Chemistry B*, *Journal of Chemical Physics*, *Physical Review E*, *Journal of Physics: Condensed Matter*, *Physica A*, *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, *European Journal of Physics*, *Physics and Chemistry of Liquids*.
7. Partecipazione al gruppo di ricerca del prof. Giuseppe Milano, Università di Salerno, nell'ambito del progetto ERC "Intelligent bulk MATERIALS for Smart TRANSPort industries (MASTRO)". Collaborazioni con la dott.ssa Greta Donati, Università di Salerno; con il prof. Michele Laus, Università del Piemonte Orientale "A. Avogadro"; con il dott. Michele Perego, IMM-CNR, Agrate Brianza; con il prof. Florian Mueller-Plathe, Università di Darmstadt; con il dott. Antonio De Nicola, Università di Yamagata; con il prof. Toshihiro Kawakatsu, Università di Tohoku, Sendai. Il titolo non è valutabile in quanto la partecipazione al gruppo di ricerca non è ancora documentata da pubblicazioni scientifiche.
8. Membro del comitato organizzatore locale della "3° International Soft Matter Conference", Sapienza Università di Roma, 15-19/09/2013.
9. Seminario su invito presso l'Università di Salerno. Titolo del seminario: "Selfassembly of patchy colloids: a theoretical and numerical approach", 11/01/2017
10. Seminario su invito presso l'Università di Messina. Titolo del seminario: "Effective interactions in polymer nanocomposites", 07/06/2018.
11. Abilitazione scientifica nazionale al ruolo di professore di seconda fascia nel settore concorsuale 02/B2 (Fisica Teorica della Materia).
12. Abilitazione scientifica nazionale al ruolo di professore di seconda fascia nel settore concorsuale 03/A2 (Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche).

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE VALUTABILI

Di seguito sono riportate, nell'ordine seguito nel CV, le pubblicazioni scientifiche valutabili del candidato dott. Munaò.

- 31) D. Lombardo, **G. Munaò**, P. Calandra, L. Pasqua and M. T. Caccamo, "Evidence of premicellar aggregates in water solution of amphiphilic PDMS-PEO block copolymer", *Phys. Chem. Chem. Phys.* DOI: 10.1039/c9cp02195g (2019).
- 30) **G. Munaò**, A. Pizzirusso, A. Kalogirou, A. De Nicola, T. Kawakatsu, F. Mueller-Plathe and G. Milano, "Molecular structure and multi-body potential of mean force in silica-polystyrene nanocomposites", *Nanoscale* **10**, 21656 (2018). *Featured on the back cover.*
- 29) M. C. Abramo, D. Costa, G. Malescio, **G. Munaò**, G. Pellicane, S. Prestipino and C. Caccamo, "Molecular dynamics determination of liquid-vapor coexistence in molten alkali halides", *Phys. Rev. E* **98**, 010103(R) (2018).
- 28) **G. Munaò**, A. Correa, A. Pizzirusso and G. Milano, "On the calculation of the potential of mean force between atomistic nanoparticles", *EPJ E* **41**, 38 (2018).
- 27) S. Prestipino, **G. Munaò**, D. Costa, G. Pellicane and C. Caccamo, "Two-dimensional mixture of amphiphilic dimers and spheres: Self-assembly behaviour", *J. Chem. Phys.* **147**, 144902 (2017). *Selected as a 2017 Editors' Choice article.*
- 26) P. O'Toole, **G. Munaò**, A. Giacometti and T. S. Hudson, "Self-assembly behaviour of heteronuclear Janus dumbbells", *Soft Matter* **13**, 7141 (2017).
- 25) **G. Munaò**, D. Costa, S. Prestipino and C. Caccamo, "Aggregation of colloidal spheres mediated by Janus dimers: A Monte Carlo study", *Colloids and Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* **532C**, 397 (2017).
- 24) S. Prestipino, **G. Munaò**, D. Costa and C. Caccamo, "Self-assembly in a model colloidal mixture of dimers and spherical particles", *J. Chem. Phys.* **146**, 084902 (2017).
- 23) **G. Munaò** and F. Saija, "Integral equation study of soft-repulsive dimeric fluids", *J. Phys.: Condens. Matt.* **29**, 115101 (2017).
- 22) **G. Munaò**, D. Costa, S. Prestipino and C. Caccamo, "Encapsulation of spherical nanoparticles by colloidal dimers", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 24922 (2016).
- 21) **G. Munaò**, D. Costa and C. Caccamo, "Development of molecular closures for the reference interaction site model theory with application to square-well and Lennard-Jones homonuclear diatomics", *J. Phys.: Condens. Matt.*, **28**, 414007 (2016).
- 20) D. Gazzillo, **G. Munaò** and S. Prestipino, "Analytic solution of two-density integral equations for sticky Janus dumbbells with arbitrary monomer diameters", *J. Chem. Phys.* **144**, 234504 (2016).
- 19) **G. Munaò** and F. Saija, "Density and structural anomalies in soft-repulsive dimeric fluids", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 9484 (2016).
- 18) S. Prestipino, C. Caccamo, D. Costa, G. Malescio and **G. Munaò**, "Shapes of a liquid droplet in a periodic box", *Phys. Rev. E*, **92**, 022141 (2015).
- 17) **G. Munaò**, F. Gàmez, D. Costa, C. Caccamo, F. Sciortino and A. Giacometti, "Reference interaction site model and optimized perturbation theories of colloidal dumbbells with increasing anisotropy", *J. Chem. Phys.* **142**, 224904 (2015).
- 16) **G. Munaò** and T. Urbic, "Structure and thermodynamics of core-softened models for alcohols", *J. Chem. Phys.* **142**, 214508 (2015).
- 15) M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, P.V. Giaquinta, G. Malescio, **G. Munaò** and S. Prestipino, "On the determination of phase boundaries via thermodynamic integration across coexistence regions", *J. Chem. Phys.* **142**, 214502 (2015).
- 14) **G. Munaò**, P. O'Toole, T. S. Hudson, D. Costa, C. Caccamo, F. Sciortino and A. Giacometti, "Cluster formation and phase separation in heteronuclear Janus dumbbells", *J. Phys. Cond. Matt.*, **27**, 234101 (2015). *Selected for inclusion in the IOP Select 2015.*
- 13) M. Hus, **G. Munaò** and T. Urbic, "Properties of a soft-core model of methanol: An integral equation theory and computer simulation study", *J. Chem. Phys.* **141**, 164505 (2014).

- 12) M. C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa and **G. Munaò**, "Communication: Phase diagram of C36 by atomistic molecular dynamics and thermodynamic integrations through coexistence regions", *J. Chem. Phys.* **141**, 091103 (2014).
- 11) Z. Preisler, T. Vissers, **G. Munaò**, F. Smallenburg and F. Sciortino, "Equilibrium phases of onepatch colloids at short interaction range", *Soft Matter* **10**, 5121 (2014).
- 10) **G. Munaò**, P. O'Toole, T. S. Hudson, D. Costa, C. Caccamo, A. Giacometti and F. Sciortino, "Phase-separation and self-assembly of colloidal dimers with tunable attractive strength: from symmetrical square wells to Janus dumbbells", *Soft Matter* **10**, 5269 (2014).
- 9) T. Vissers, F. Smallenburg, **G. Munaò**, Z. Preisler and F. Sciortino, "Cooperative polymerization of onepatch colloids", *J. Chem. Phys.* **140**, 144902 (2014).
- 8) **G. Munaò**, Z. Preisler, T. Vissers, F. Smallenburg and F. Sciortino, "Cluster formation in onepatch colloids: low coverage results", *Soft Matter* **9**, 2652 (2013).
- 7) Z. Preisler, T. Vissers, F. Smallenburg, **G. Munaò** and F. Sciortino, "Phase diagram of one-patch colloids forming tubes and lamellae", *J. Phys. Chem. B* **117**, 9540 (2013).
- 6) **G. Munaò**, D. Costa, A. Giacometti, C. Caccamo and F. Sciortino, "Structure and phase behavior of colloidal dumbbells with tunable attractive interactions", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 20590 (2013).
- 5) **G. Munaò**, D. Costa, F. Sciortino and C. Caccamo, "Simulation and theory of a model for tetrahedral colloidal particles", *J. Chem. Phys.* **134**, 194502 (2011).
- 4) **G. Munaò**, D. Costa, F. Saija and C. Caccamo, "Simulation and reference interaction site model theory of methanol and carbon tetrachloride mixtures", *J. Chem. Phys.* **132**, 084506 (2010).
- 3) **G. Munaò**, D. Costa and C. Caccamo, "Thermodynamically consistent reference interaction site model theory of the tangent diatomic fluid", *Chem. Phys. Lett.* **470**, 240 (2009).
- 2) **G. Munaò**, D. Costa and C. Caccamo, "Reference interaction site model investigation of homonuclear hard dumbbells under simple fluid theory closures: Comparison with Monte Carlo simulations", *J. Chem. Phys.* **130**, 144504 (2009).
- 1) D. Costa, **G. Munaò**, F. Saija and C. Caccamo, "Reference interaction site model and molecular dynamics study of structure and thermodynamics of methanol", *J. Chem. Phys.* **127**, 224501 (2007).

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE NON VALUTABILI

Non è valutabile, in quanto ancora non accettato per la pubblicazione, il lavoro in elenco al punto 32) T. Yamanaka, A. De Nicola, **G. Munaò**, T. A. Soares and G. Milano, "Effect of the Ligand's Bulkiness on the Shape of Functionalized Gold Nanoparticles in Aqueous Solutions: A Molecular Dynamics Study", **submitted** to *Chem. Phys. Lett.* (2019).

Non sono valutabili tutti i contributi scientifici presentati a congressi (in elenco nel CV presentato dal candidato in quanto abstract in atti di congresso).

TESI DI DOTTORATO

Il candidato dott. Munaò ha conseguito il dottorato di Ricerca in Fisica presso l'Università di Messina. Il Candidato non allega alla domanda la tesi di dottorato, pertanto la Commissione non può esprimere un giudizio di merito su di essa, anche se, dal titolo "Improvements of RISM theory in molecular liquids investigations" si può evincere che i contenuti siano solo parzialmente congruenti con le tematiche proprie del SSD CHIM/02 (Chimica Fisica).

MOTIVATO GIUDIZIO ANALITICO SUI TITOLI, SUL CURRICULUM E SULLA PRODUZIONE SCIENTIFICA IVI COMPRESA LA TESI DI DOTTORATO

GIUDIZI INDIVIDUALI:

Prof.ssa Angela Agostiano

Il candidato dott. Munaò Gianmarco presenta un curriculum molto buono dal punto di vista delle attività scientifiche e trascurabile da quello delle attività didattiche. Ha svolto periodi di ricerca sia in Italia che all'estero, dimostrando una notevole autonomia di ricerca, documentata dal fatto che è stato il principale investigatore in numerosi progetti finanziati e dal fatto che ha instaurato svariate collaborazioni personali sia in Italia che all'estero. Ha partecipato, anche su invito, ad un buon numero di congressi nazionali e internazionali.

La sua produzione scientifica è buona e continua, pubblicata su riviste di buon impatto internazionale.

In molti dei suoi lavori compare come primo nome. La sua attività di ricerca è svolta principalmente nel campo delle proprietà chimico-fisiche di liquidi molecolari con un approccio teorico utilizzando prevalentemente tecniche di simulazione computazionale. In questo campo ha ottenuto numerosi riconoscimenti. Non presenta una attività didattica valutabile.

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa Angela Agostiano esprime parere positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica del Dott. Munaò

Prof.ssa Loredana Latterini

Il candidato dott. Munaò, presenta un profilo curriculare di livello molto buono dal punto di vista delle attività di ricerca, ma trascurabile per le attività didattiche.

Ha svolto attività di ricerca in ambito accademico in Italia utilizzando approcci computazionali nello studio delle proprietà di sistemi molecolari e colloidali. Il candidato ha svolto attività di ricerca con sufficiente continuità temporale dal 2007 ad oggi, occupandosi di diverse tematiche in buona parte coerenti con le tematiche del Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02.

Ha partecipato a numerosi progetti nazionali e internazionali e documenta una cospicua rete internazionale di collaborazioni.

Il candidato presenta per la valutazione 31 pubblicazioni scientifiche, che sono valutate mediante di livello molto buono per collocazione editoriale ed impatto sulla comunità scientifica di riferimento. Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni è mediamente molto buono per qualità e rigore metodologico e buono per innovatività; i contenuti scientifici sono giudicati in buona parte coerenti con le tematiche del Settore Concorsuale 03/A2. Nei lavori in collaborazione il contributo individuale del candidato è ottimo, evidenziando un'elevata autonomia di ricerca.

In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa Loredana Latterini esprime parere più che positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica del Dott. Munaò.

Prof.ssa Concetta De Stefano

Il candidato dott. Gianmarco Munaò presenta un buon profilo curriculare. Ha conseguito il titolo di Dottore di Ricerca in Fisica, discutendo una tesi dal titolo: "*Improvements of RISM theory in molecular liquids investigations*", presso l'Università degli studi di Messina nel 2009. L'attività didattica, presentata dal candidato, è limitata ad attività di supporto e non è risultata valutabile in base ai criteri stabiliti nel verbale n. 1 del 31 Luglio 2019. L'attività di ricerca del candidato è stata svolta nell'ambito delle modellizzazioni teoriche dei solventi. E' stato titolare di assegni di ricerca presso le Università di Roma "la Sapienza", di Messina e di Salerno, di una borsa di studio di studio per attività di ricerca presso l'Università di Roma "La Sapienza" e di un contratto di lavoro autonomo occasionale presso l'Università di Messina. La produzione scientifica presentata dal candidato per la valutazione, svolta in collaborazione con colleghi di diverse università italiane e straniere, consiste in n. 31 pubblicazioni ISI ed è caratterizzata da una ottima continuità con un buon apporto personale. Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni è buono per qualità, ottimo per rigore metodologico, buono per innovatività e per la rilevanza scientifica della collocazione editoriale. Il candidato ha ottenuto anche alcuni riconoscimenti per la qualità della sua attività di ricerca. La coerenza delle pubblicazioni con le tematiche del Settore Concorsuale 03/A2 e del SSD CHIM/02-Chimica Fisica è buona, così come l'impatto sulla comunità scientifica di riferimento. Il candidato non ha presentato la tesi di dottorato per la valutazione, pertanto non è stato possibile esprimere un giudizio di merito, anche se dal titolo si può

evincere che la tematica di ricerca affrontata sia solo parzialmente congruente con il SSD CHIM/02. Buona la partecipazione a progetti di ricerca e la partecipazione come relatore a congressi nazionali e internazionali. In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, il commissario Prof.ssa De Stefano esprime parere positivo sul curriculum, i titoli e la produzione scientifica del candidato Dott. Gianmarco Munaò.

GIUDIZIO COLLEGALE

Il curriculum vitae del dott. Gianmarco Munaò viene giudicato positivamente dalla commissione, in quanto soddisfa i criteri precedentemente stabiliti, nonostante il candidato abbia conseguito il titolo di dottore di ricerca in un ambito disciplinare differente, le cui tematiche sono solo parzialmente congruenti con quelle proprie del settore SSD CHIM/02.

Il candidato presenta una modesta attività didattica che è stata svolta solo come didattica di supporto non congruente con il SC 03/A2 e il SSD CHIM/02 e non valutabile secondo i criteri stabiliti dalla Commissione nel verbale n.1 del 31 Luglio 2019. L'attività di ricerca scientifica del candidato, valutata secondo i criteri riportati nel verbale n.1, è stata svolta inizialmente presso l'università di Roma "La Sapienza" ed ha riguardato principalmente l'ambito delle modellizzazioni teoriche dei solventi, dalle simulazioni dei fluidi tetraedrici all'assemblaggio di colloidi. Successivamente, presso l'università di Messina, il candidato ha continuato le sue ricerche negli ambiti precedentemente esposti. Dal 2017 al 2019, presso l'università di Salerno, la sua ricerca è stata rivolta all'organizzazione di film organici sottili e di materiali intelligenti per le industrie di trasporti. La produzione scientifica del candidato risulta complessivamente congruente con le tematiche del SSD CHIM/02 – Chimica Fisica. E' stato titolare di assegni e borse per attività di ricerca dal 2011 all'aprile 2019. Il giudizio sui contenuti scientifici delle pubblicazioni presentate dal candidato è buono per originalità, innovatività, rigore metodologico e per la rilevanza scientifica della collocazione editoriale e diffusione all'interno della comunità scientifica. Il Dott. Munaò è autore, in collaborazione anche con colleghi di altre università italiane e straniere, di n. 31 contributi scientifici pubblicati su riviste internazionali ISI, n. 9 comunicazioni a workshop (di cui tre su invito) e congressi nazionali ed internazionali. Ottimo l'apporto individuale del candidato in ogni pubblicazione presentata.

Buono è il livello di partecipazione a progetti di ricerca. Buona è la sua attività di referee per qualificate riviste internazionali. Ha ricevuto numerosi riconoscimenti per la sua attività di ricerca. Per quel che riguarda gli indicatori numerici dell'attività scientifica del candidato (fonte scopus), riferiti alla data di scadenza dei termini delle candidature, essi risultano essere:

- a) numero medio di citazioni per pubblicazione: 11
- b) IF medio per pubblicazione 3.11 (calcolato considerando IF 2017)
- c) indice di Hirsch: 11

Il giudizio sui risultati ottenuti dal candidato in termini di impatto e continuità della sua attività scientifica è buono per impact factor medio, per il numero medio delle citazioni, per l'indice di Hirsch e per l'intensità e la continuità temporale della produzione scientifica.

La Commissione giudica l'attività di ricerca scientifica del candidato Dott. Munaò, anche sulla base degli indicatori numerici sopra citati e sulla base dei dati sull'attività scientifica, di buona rilevanza internazionale. In considerazione dei criteri espressi nel Verbale n.1, la Commissione, all'unanimità, esprime parere positivo sul curriculum vitae, i titoli e la produzione scientifica del Dott. Gianmarco Munaò e ritiene che il candidato sia meritevole di essere ammesso alla discussione pubblica.

LA COMMISSIONE

Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente)

Prof.ssa Loredana LATTERINI (Componente)

Prof.ssa Concetta DE STEFANO (Segretario)





PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

ALLEGATO B)

CANDIDATI AMMESSI ALLA DISCUSSIONE

1. Dott. GONTRANI Lorenzo
2. Dott.ssa LA GANGA Giuseppina
3. Dott. MUNAO' Gianmarco

LA COMMISSIONE

Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente)

Prof.ssa Loredana LATTERINI (Componente)

Prof.ssa Concetta DE STEFANO (Segretario)

Caracciolo & Le Manno

La discussione pubblica avrà luogo il giorno 20 Settembre 2019 alle ore 10:00 presso la sala riunioni del Dipartimento CHIBIOFARAM, secondo piano dell'Incubatore di Imprese (Polo Papardo), Viale F. Stagno d'Alcontres, 31-98166 Messina



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

DICHIARAZIONE DI CONFORMITA'

La sottoscritta Prof.ssa Angela Agostiano dichiara di avere partecipato, in via telematica, alla riunione tenutasi il 26 Agosto 2019 alle ore 10:00 per lo svolgimento dei lavori della procedura di valutazione comparativa per la stipula di n. 1 contratto di diritto privato per ricercatore, a tempo determinato, per il Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche e per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02- Chimica Fisica, bandita dall'Università degli Studi di Messina, ai sensi dell'art. 24, comma 3, lettera b) della legge 30 dicembre 2010, n. 240 e di avere preso parte alla stesura del relativo verbale, aderendo al contenuto dello stesso.

Bari, li 26 Agosto 2019

(Prof.ssa Angela Agostiano)



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

DICHIARAZIONE DI CONFORMITA'

La sottoscritta Prof.ssa Loredana Latterini dichiara di avere partecipato, in via telematica, alla riunione tenutasi il 26 Agosto 2019 alle ore 10:00 per lo svolgimento dei lavori della procedura di valutazione comparativa per la stipula di n. 1 contratto di diritto privato per ricercatore, a tempo determinato, per il Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche e per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02- Chimica Fisica, bandita dall'Università degli Studi di Messina, ai sensi dell'art. 24, comma 3, lettera b) della legge 30 dicembre 2010, n. 240 e di avere preso parte alla stesura del relativo verbale, aderendo al contenuto dello stesso.

Perugia, li 26 Agosto 2019

(Prof.ssa Loredana Latterini)



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

**VERBALE N. 3
(Discussione pubblica e punteggi)**

L'anno 2019 il giorno 20 del mese di Settembre alle ore 10:00 si riunisce al completo, in parte per via telematica, la Commissione giudicatrice nominata con D.R. n. 1606/2019 prot. n. 70908 del 22/07/19, pubblicato sul sito internet dell'Università di Messina, della suddetta procedura di valutazione comparativa per procedere con la discussione pubblica dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati precedentemente ammessi e la contestuale prova orale volta ad accertare l'adeguata conoscenza della lingua straniera.

La riunione odierna si svolge presso la sala riunioni del Dipartimento CHIBIOFARAM, secondo piano dell'Incubatore di Imprese (Polo Papardo), Viale F. Stagno d'Alcontres, 31-98166 Messina.

E' presente in sede il Segretario della Commissione, Prof.ssa Concetta De Stefano. La Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente) e la Prof.ssa Loredana LATTERINI (componente) sono in collegamento telematico ognuno presso la propria sede universitaria.

Alle ore 10:05 il Presidente, avendo accertata la presenza dei Prof.ri Angela Agostiano e Loredana Latterini in collegamento telematico, dichiara aperta la seduta.

Alla discussione sono stati espressamente invitati tutti i docenti dell'Università di Messina appartenenti allo stesso Settore Scientifico Disciplinare ed a settori affini rispetto a quello cui si riferisce la procedura di selezione. La Commissione dà atto che i canali telematici in utilizzo (skype, webcam) sono idonei al riconoscimento dei soggetti coinvolti e che sono stati appositamente allestiti degli schermi per assicurare la trasparenza della seduta e garantire la partecipazione dei docenti invitati alla discussione.

La Commissione procede, quindi, all'appello dei candidati ammessi nella riunione precedente.

Sono presenti in sede i seguenti candidati dei quali è accertata l'identità personale (foglio firma, Allegato A).

1. Dott.ssa LA GANGA Giuseppina
2. Dott. MUNAO' Gianmarco

Risulta assente il Dott. GONTRANI Lorenzo.

I candidati sono chiamati a sostenere la discussione in ordine alfabetico.

La candidata Dott.ssa Giuseppina La Ganga è chiamata a sostenere la discussione pubblica alle ore 10:15

Il candidato Dott. Gianmarco MUNAO' è chiamato a sostenere la discussione pubblica alle ore 10:39.

Al termine della discussione pubblica, la Commissione procede ad attribuire un punteggio ai titoli e a ciascuna delle pubblicazioni, tenendo conto dei criteri stabiliti nella prima riunione (Allegato B).

Riesaminati i motivati giudizi analitici espressi nella valutazione preliminare, sulla base dei punteggi attribuiti ai titoli e alle pubblicazioni in esito alla discussione pubblica, la Commissione, all'unanimità, dichiara vincitore la **dott.ssa Giuseppina La Ganga (punteggio totale 95.1/100)** con la seguente motivazione:

La Dott.ssa Giuseppina La Ganga ha una intensa produttività scientifica, pertinente con il settore concorsuale 03/A2- Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche e con il SSD CHIM/02 (Chimica Fisica), che dimostra un'ottima formazione scientifica ed una ottima e continua attività di ricerca nel campo della fotochimica e della fotocatalisi. Ha partecipato a diversi progetti di ricerca ed ha al suo attivo numerose collaborazioni nazionali ed internazionali. In qualità di relatore, anche su invito, ha presentato i risultati della sua attività a diversi convegni scientifici nazionali e internazionali. E' stata insignita di un prestigioso premio internazionale per la sua tesi di dottorato. I punteggi attribuiti dopo la discussione dei titoli e delle pubblicazioni indicano che la candidata Dott.ssa Giuseppina La Ganga è pienamente idonea a ricoprire il posto di ricercatore a tempo determinato di cui alla presente procedura.

La Commissione predispose, inoltre, sulla base dei punteggi conseguiti, una graduatoria degli idonei, dalla quale sarà possibile attingere non oltre il termine di un anno dalla pubblicazione della stessa:

CANDIDATO	TOTALE PUNTEGGIO VALUTAZIONE TITOLI	TOTALE PUNTEGGIO VALUTAZIONE PUBBLICAZIONI	TOTALE PUNTEGGIO ASSEGNATO AL CANDIDATO
MUNAO' Gianmarco	22/40	36.6/60	58.6/100

Il presente verbale viene redatto, letto, sottoscritto seduta stante.

La seduta è tolta alle ore 12:05

LA COMMISSIONE

Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente)

Prof.ssa Loredana LATTERINI (Componente)

Prof.ssa Concetta DE STEFANO (Segretario)

ALLEGATO B)

PUNTEGGIO TITOLI E PUBBLICAZIONI E VALUTAZIONE CONOSCENZA LINGUA STRANIERA

CANDIDATO: Dott.ssa LA GANGA Giuseppina

VALUTAZIONE TITOLI

<i>Titoli valutabili</i>	<i>Criteri di Valutazione (Verbale n.1) /punteggi</i>	<i>Punti assegnati</i>	<i>Punteggio Totale</i>
a) dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'Estero	<i>fino ad un massimo di punti 6/40, così ripartiti: 6 punti se congruente con il settore concorsuale 03/A2- Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche; da 1 a 5 punti, se parzialmente congruente, secondo giudizio della Commissione; 0 punti se non congruente con il concorsuale 03/A2- Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche.</i>	6	6
b) attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero	<i>fino ad un massimo di punti 6/40, così ripartiti: 3 punti per ogni corso (attività di docenza frontale o di laboratorio di almeno 40 ore o 5 CFU) congruente con il settore concorsuale; per attività didattica di supporto congruente con il settore concorsuale: 1 punto per ogni 25 ore di attività di docenza frontale o di laboratorio; 0.5 punti per ogni 25 ore di attività di docenza frontale o di laboratorio non congruente con il settore concorsuale..</i>	10(>6)	6
c) documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	<i>fino ad un massimo di punti 5/40, così ripartiti: 2 punti per ogni documentata attività della durata di 12 mesi. Nel caso di periodi inferiori a 12 mesi, il punteggio sarà calcolato in proporzione al periodo di svolgimento dell'attività.</i>	9.7 (>5)	5
d) organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	<i>fino ad un massimo di punti 4/40, così ripartiti: 3 punti per ciascuna attività di organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca internazionali; 2.5 punti per ciascuna documentata attività di organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali; 2 punti per ciascuna documentata partecipazione ad attività di ricerca di gruppi di ricerca internazionali; 1 punto per ciascuna documentata partecipazione ad attività di ricerca di gruppi di ricerca nazionali</i>	45 (>4)	4
e) titolarità di brevetti relativamente ai settori concorsuali nei quali è prevista	<i>fino ad un massimo di punti 3/40, così ripartiti: 1 punto per ogni brevetto.</i>	0	0
f) relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	<i>fino ad un massimo di punti 8/40 così ripartiti: 0.5 punti per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza nazionale; 1 punto per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza nazionale su invito; 2 punti per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza internazionale; 6 punti per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza internazionale su invito; 0.1 punti per ogni relazione orale a meeting di progetti o workshop nazionali; 0.2 punti per ogni relazione orale a meeting di progetti o workshop internazionali.</i>	8.1(>8)	8
g) premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	<i>fino ad un massimo di punti 8/40 così ripartiti: 4 punti per documentato premio nazionale riconosciuto; 8 punti per documentato premio internazionale riconosciuto; 0.5 punti per altri premi (miglior poster, miglior presentazione, cover article...).</i>	9(>8)	8

Punteggio Totale Titoli 37/40

VALUTAZIONE PUBBLICAZIONI

<i>Publicazione n. (la numerazione fa riferimento all'elenco di cui all'allegato A del verbale n. 2)</i>	<i>a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica-fino ad un max di punti 10/60</i>	<i>b) congruenza di ciascuna pubblicazione con il settore concorsuale- fino ad un max di punti 10/60</i>	<i>c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale e diffusione - fino ad un max di punti 30/60</i>	<i>d) determinazione analitica dell'apporto individuale del candidato-fino ad un max di punti 10/60.</i>

1	1	1	0.3	0.4
2	1	1	0.3	1
3	1	1	0.9	0.7
4	1	1	0.3	0.4
5	1	1	4	0.4
6	1	1	0.3	1
7	1	1	4	0.7
8	1	1	0	0.7
9	1	1	0.3	0.4
10	1	1	4	0.7
11	1	1	0.3	1
12	1	1	0.9	1
13	1	1	0.3	0.4
14	1	1	0.3	0.4
15	0.6	1	0	0.4
16	1	1	0.1	0.4
17	1	1	0.1	0.7
18	1	1	0.1	0.4
19	1	1	0.3	0.7
20	1	1	4	0.4
21	1	1	0.1	0.4
22	1	0.5	0.9	0.4
23	1	1	6	0.4
24	1	1	0.3	0.4
Totale nominale	23.6(>10)	23.5 (>10)	28.1	13.8 (>10)
Punteggio complessivo pubblicazioni	10	10	28.1	10

Punteggio Totale Pubblicazioni

58.1/60

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione scientifica della candidata Dott.ssa Giuseppina La Ganga, caratterizzata sempre da un ottimo rigore metodologico e pienamente congruente con le tematiche proprie del Settore Concorsuale 03/A2 e del SSD CHIM/02, risulta continua, consistente, anche in relazione al periodo di attività (il candidato presenta n. 24 pubblicazioni prodotte a partire dal 2009), e di elevata qualità ed eccellente innovatività. I lavori sono stati pubblicati su riviste scientifiche di ottima rilevanza internazionale e di elevato fattore di impatto. Le tematiche di ricerca affrontate dalla Dott.ssa La Ganga riguardano la fotochimica supramolecolare ed in particolare la fotocatalisi per l'ossidazione dell'acqua ad ossigeno molecolare. La Commissione giudica ottima la consistenza complessiva della produzione scientifica della candidata Dott.ssa Giuseppina La Ganga in relazione alla intensità ed alla continuità temporale.

VALUTAZIONE CONOSCENZA LINGUA STRANIERA Inglese: sufficiente.

La conoscenza della lingua straniera è stata valutata tramite lettura e traduzione di un brano scientifico estratto dal libro: J. P. Allen -Biophysical Chemistry. Ed. Wiley Blackwell – ISBN: 978-1405124362

CANDIDATO: Dott. Gianmarco Munaò

VALUTAZIONE TITOLI

<i>Titoli valutabili</i>	<i>Criteri di Valutazione (Verbale n.1) /punteggi</i>	<i>Punti assegnati</i>	<i>Punteggio Totale</i>
a) dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, conseguito in Italia o all'Estero	<i>fino ad un massimo di punti 6/40, così ripartiti: 6 punti se congruente con il settore concorsuale 03/A2- Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche; da 1 a 5 punti, se parzialmente congruente, secondo giudizio della Commissione; 0</i>	4	4

	<i>punti se non congruente con il concorsuale 03/A2- Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche.</i>		
b) attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero	<i>fino ad un massimo di punti 6/40, così ripartiti: 3 punti per ogni corso (attività di docenza frontale o di laboratorio di almeno 40 ore o 5 CFU) congruente con il settore concorsuale; per attività didattica di supporto congruente con il settore concorsuale: 1 punto per ogni 25 ore di attività di docenza frontale o di laboratorio; 0.5 punti per ogni 25 ore di attività di docenza frontale o di laboratorio non congruente con il settore concorsuale..</i>	0	0
c) documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	<i>fino ad un massimo di punti 5/40, così ripartiti: 2 punti per ogni documentata attività della durata di 12 mesi. Nel caso di periodi inferiori a 12 mesi, il punteggio sarà calcolato in proporzione al periodo di svolgimento dell'attività.</i>	13.5 (>5)	5
d) organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	<i>fino ad un massimo di punti 4/40, così ripartiti: 3 punti per ciascuna attività di organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca internazionali; 2.5 punti per ciascuna documentata attività di organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali; 2 punti per ciascuna documentata partecipazione ad attività di ricerca di gruppi di ricerca internazionali; 1 punto per ciascuna documentata partecipazione ad attività di ricerca di gruppi di ricerca nazionali</i>	40.5(>4)	4
e) titolarità di brevetti relativamente ai settori concorsuali nei quali è prevista	<i>fino ad un massimo di punti 3/40, così ripartiti: 1 punto per ogni brevetto.</i>	0	0
f) relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	<i>fino ad un massimo di punti 8/40 così ripartiti: 0.5 punti per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza nazionale; 1 punto per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza nazionale su invito; 2 punti per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza internazionale; 6 punti per ogni relazione orale a congresso scientifico di risonanza internazionale su invito; 0.1 punti per ogni relazione orale a meeting di progetti o workshop nazionali; 0.2 punti per ogni relazione orale a meeting di progetti o workshop internazionali.</i>	7.5	7.5
g) premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	<i>fino ad un massimo di punti 8/40 così ripartiti: 4 punti per documentato premio nazionale riconosciuto; 8 punti per documentato premio internazionale riconosciuto; 0.5 punti per altri premi (miglior poster, miglior presentazione, cover article...).</i>	1.5	1.5

Punteggio Totale Titoli

22/40

VALUTAZIONE PUBBLICAZIONI

<i>Publicazione n. (la numerazione fa riferimento all'elenco di cui all'allegato A del verbale n. 2)</i>	<i>a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica- fino ad un max di punti 10/60</i>	<i>b) congruenza di ciascuna pubblicazione con il settore concorsuale- fino ad un max di punti 10/60</i>	<i>c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale e diffusione -fino ad un max di punti 30/60</i>	<i>d) determinazione analitica dell'apporto individuale del candidato-fino ad un max di punti 10/60.</i>
1	1	1	0.1	0.7
2	1	1	0.1	1
3	0.8	0.5	0.1	1
4	1	1	0.1	1
5	0.7	0.5	0.1	1
6	1	1	0.3	1
7	1	1	0.3	0.4
8	1	1	0.3	1
9	1	1	0.1	0.4
10	1	1	0.3	1
11	1	1	0.3	0.4
12	1	1	0.1	0.4
13	1	1	0.1	0.7
14	0.5	0.5	0.1	1
15	1	1	0.1	0.4
16	1	1	0.1	1
17	1	1	0.1	1
18	0.5	0.5	0.1	0.4
19	1	1	0.3	1
20	1	1	0.1	0.7
21	0.5	0.5	0.1	1

22	1	1	0.3	1
23	1	1	0.1	1
24	1	1	0.1	0.7
25	1	1	0.1	1
26	1	1	0.3	0.7
27	1	1	0.1	0.7
28	0.5	0.5	0.1	1
29	0.5	0.5	0.1	0.4
30	1	1	1.8	1
31	1	1	0.3	0.7
Totale nominale	28.0 (>10)	27.5 (>10)	6.6	24.7 (>10)
Punteggio complessivo pubblicazioni	10	10	6.6	10

Punteggio Totale Pubblicazioni 36.6/60

CONSISTENZA COMPLESSIVA DELLA PRODUZIONE SCIENTIFICA

La produzione scientifica del candidato Dott. Gianmarco Munaò, caratterizzata da un ottimo rigore metodologico e congruente con le tematiche proprie del Settore Concorsuale 03/A2 e del SSD CHIM/02, risulta continua, consistente, anche in relazione al periodo di attività (il candidato presenta n. 31 pubblicazioni prodotte a partire dal 2007) e di buona qualità. I lavori sono stati pubblicati su riviste scientifiche di buona rilevanza internazionale e fattore di impatto. Le tematiche di ricerca affrontate riguardano principalmente la modellizzazione di liquidi molecolari e le loro proprietà chimico-fisiche. La Commissione giudica buona la consistenza complessiva della produzione scientifica del candidato Dott. Gianmarco Munaò in relazione alla intensità ed alla continuità temporale.

VALUTAZIONE CONOSCENZA LINGUA STRANIERA Inglese: sufficiente.

La conoscenza della lingua straniera è stata valutata tramite lettura e traduzione di un brano scientifico estratto dal libro: J. P. Allen -Biophysical Chemistry. Ed. Wiley Blackwell – ISBN: 978-1405124362

LA COMMISSIONE

Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente)

Prof.ssa Loredana LATTERINI (Componente)

Prof.ssa Concetta DE STEFANO (Segretario)



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

DICHIARAZIONE DI CONFORMITA'

La sottoscritta Prof.ssa Angela Agostiano dichiara di avere partecipato, in via telematica, alla riunione tenutasi il 20 Settembre 2019 alle ore 10:00 per lo svolgimento dei lavori della procedura di valutazione comparativa per la stipula di n. 1 contratto di diritto privato per ricercatore, a tempo determinato, per il Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche e per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02- Chimica Fisica, bandita dall'Università degli Studi di Messina, ai sensi dell'art. 24, comma 3, lettera b) della legge 30 dicembre 2010, n. 240 e di avere preso parte alla stesura del relativo verbale, aderendo al contenuto dello stesso.

Bari, lì 20 Settembre 2019

(Prof.ssa Angela Agostiano)



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

DICHIARAZIONE DI CONFORMITA'

La sottoscritta Prof.ssa Loredana Latterini dichiara di avere partecipato, in via telematica, alla riunione tenutasi il 20 Settembre 2019 alle ore 10:00 per lo svolgimento dei lavori della procedura di valutazione comparativa per la stipula di n. 1 contratto di diritto privato per ricercatore, a tempo determinato, per il Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche e per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02- Chimica Fisica, bandita dall'Università degli Studi di Messina, ai sensi dell'art. 24, comma 3, lettera b) della legge 30 dicembre 2010, n. 240 e di avere preso parte alla stesura del relativo verbale, aderendo al contenuto dello stesso.

Perugia, li 20 Settembre 2019

(Prof.ssa Loredana Latterini)



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

RELAZIONE CONCLUSIVA

Il giorno 20 del mese di Settembre dell'anno 2019 alle ore 12:10 si riunisce presso si riunisce al completo, per via telematica, ognuno nella propria sede universitaria, la Commissione giudicatrice composta da:

Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente)

Prof.ssa Loredana LATTERINI (Componente)

Prof.ssa Concetta DE STEFANO, (Componente-Segretario)

per la valutazione comparativa di cui sopra, per stendere la relazione conclusiva.

La Commissione ha svolto i suoi lavori nei giorni:

I riunione: giorno 31 Luglio 2019 dalle ore 9:00 alle ore 10:30;

II riunione: giorno 26 Agosto 2019 dalle ore 10:00 alle ore 13:00;

III riunione: giorno 9 Maggio 2019 dalle ore 10:00 alle ore 12:05.

La Commissione ha tenuto complessivamente n. 3 riunioni iniziando i lavori il 31 Luglio 2019 e concludendoli il 20 Settembre 2019.

Nella prima riunione (*Verbale n. 1 del 31/07/2019*) i Commissari, in apertura di seduta, hanno dichiarato di non trovarsi tra di loro in rapporto di parentela o affinità fino al quarto grado incluso e che non sussiste alcuna situazione di incompatibilità tra essi, ai sensi degli artt. 51 e 52 c.p.c. e del D.Lgs. 1172/1948, con gli altri membri della Commissione. La Commissione ha proceduto alla nomina del Presidente nella persona della Prof.ssa Angela Agostiano e del Segretario verbalizzante nella persona della Prof.ssa Concetta De Stefano. A conclusione della prima riunione, la Commissione ha determinato i criteri di massima per la valutazione comparativa dei titoli, dei curricula e della produzione scientifica dei candidati, ivi compresa la tesi di dottorato, secondo i parametri riconosciuti anche in ambito internazionale ed individuati con D.M. 25 maggio 2011 n. 243.

Nella seconda riunione (*Verbale n. 2 del 26/08/2019*), la Commissione ha proceduto alla valutazione comparativa dei titoli, dei curricula e della produzione scientifica dei candidati, ivi compresa la tesi di dottorato, esprimendo per ciascun candidato un motivato giudizio analitico sui titoli, sul curriculum e sulla produzione scientifica, ivi compresa la tesi di dottorato, sulla base dei criteri stabiliti nella prima riunione. A conclusione di questa seconda riunione sono risultati ammessi alla discussione pubblica dei titoli e delle pubblicazioni i dott.ri Lorenzo Gontrani, Giuseppina La Ganga e Gianmarco Munaò.

Nella terza ed ultima riunione (*Verbale n. 3 del 20/09/2019*), i candidati presenti dott.ri **LA GANGA Giuseppina e MUNAO' Gianmarco** hanno discusso pubblicamente innanzi alla Commissione, in parte collegata per via telematica (Skype) i titoli e le pubblicazioni ed hanno sostenuto la contestuale prova orale volta ad accertare l'adeguata conoscenza della lingua straniera. La Commissione ha quindi attribuito un punteggio ai titoli ed alle pubblicazioni ed ha espresso un giudizio sulla adeguata conoscenza della lingua Inglese, per ognuno dei candidati. Al termine, la Commissione ha formulato la presente relazione conclusiva. La Commissione, tenuto conto della somma dei punteggi attribuiti, ha proceduto collegialmente all'espressione di un motivato giudizio in relazione alla quantità e alla qualità delle pubblicazioni valutando la produttività complessiva anche in relazione al periodo di attività.

La Commissione dichiara vincitore la dott.ssa **La Ganga Giuseppina** avendo ottenuto l'unanimità dei voti dei componenti della commissione giudicatrice.

La Commissione predispose inoltre, sulla base dei punteggi conseguiti, una graduatoria dei partecipanti più meritevoli, dalla quale sarà possibile attingere non oltre il termine di un anno dalla pubblicazione della stessa:

1. Dott. MUNAO' Gianmarco

La Prof.ssa Concetta De Stefano, Componente Segretario della presente Commissione, si impegna a consegnare tutti gli atti concorsuali al responsabile del Procedimento.

Il plico contenente n. 1 copia dei verbali delle singole riunioni e della relazione riassuntiva viene consegnato al Responsabile del Procedimento.

I verbali della presente procedura, già inseriti nella piattaforma informatica saranno resi pubblici sul sito web dell'Ateneo a seguito dell'approvazione degli atti della procedura da parte del Rettore.

La Commissione termina i lavori alle ore 12:40 del giorno 20 Settembre 2019.

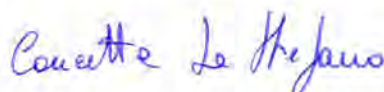
Letto approvato e sottoscritto

LA COMMISSIONE

Prof.ssa Angela AGOSTIANO (Presidente)

Prof.ssa Loredana LATTERINI (Componente)

Prof.ssa Concetta DE STEFANO (Segretario)





**PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.
DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA**

DICHIARAZIONE DI CONFORMITA'

La sottoscritta Prof.ssa Angela Agostiano dichiara di avere partecipato, in via telematica, alla riunione tenutasi il 20 Settembre 2019 alle ore 12:10 per lo svolgimento dei lavori della procedura di valutazione comparativa per la stipula di n. 1 contratto di diritto privato per ricercatore, a tempo determinato, per il Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche e per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02- Chimica Fisica, bandita dall'Università degli Studi di Messina, ai sensi dell'art. 24, comma 3, lettera b) della legge 30 dicembre 2010, n. 240 e di avere preso parte alla stesura della relazione conclusiva della Commissione giudicatrice, aderendo al contenuto della stessa.

Bari, li 20 Settembre 2019

(Prof.ssa Angela Agostiano)



PROCEDURA DI VALUTAZIONE COMPARATIVA A N. 1 CONTRATTO (senior) DI DIRITTO PRIVATO PER RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO, IN REGIME DI IMPEGNO A TEMPO PIENO, AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 3, LETT. B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240, PER IL S.C. 03/A2-MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE S.S.D. CHIM/02- CHIMICA FISICA.

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, BIOLOGICHE, FARMACEUTICHE E AMBIENTALI (CHIBIOFARAM) PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

DICHIARAZIONE DI CONFORMITA'

La sottoscritta Prof.ssa Loredana Latterini dichiara di avere partecipato, in via telematica, alla riunione tenutasi il 20 Settembre 2019 alle ore 12:10 per lo svolgimento dei lavori della procedura di valutazione comparativa per la stipula di n. 1 contratto di diritto privato per ricercatore, a tempo determinato, per il Settore Concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche e per il Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02- Chimica Fisica, bandita dall'Università degli Studi di Messina, ai sensi dell'art. 24, comma 3, lettera b) della legge 30 dicembre 2010, n. 240 e di avere preso parte alla stesura della relazione conclusiva della Commissione giudicatrice, aderendo al contenuto della stessa.

Perugia, li 20 Settembre 2019

(Prof.ssa Loredana Latterini)