

**PROCEDURA PER LA PROROGA DEL CONTRATTO DI RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO DI CUI ALL'ART. 24, COMMA 3, LETTERA A), DELLA LEGGE N. 240/2010, STIPULATO CON IL DOTT. FRANCESCO DI MAIOLO PRESSO L'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PARMA DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, DELLA VITA E DELLA SOSTENIBILITA' AMBIENTALE PER IL SETTORE CONCORSUALE: 03/A2 "MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE" ORA G.S.D. 03/CHEM-02 "CHIMICA FISICA" - S.S.D. CHIM/02 "CHIMICA FISICA" ORA CHEM-02/A "CHIMICA FISICA"**

La Commissione di valutazione della procedura, di cui all'art. 2 del D.M. n. 242/2011 del 24.05.2011, per la proroga del contratto di Ricercatore a tempo determinato ex art. 24, comma 3, lett. a), della Legge n. 240/2010, stipulato con il Dott. Francesco DI MAIOLO, presso l'Università degli Studi di Parma, Dipartimento di Scienze Chimiche, della Vita e della Sostenibilità Ambientale per il Settore Concorsuale 03/A2 "Modelli e metodologie per le scienze chimiche" ora G.S.D. 03/CHEM-02 "Chimica fisica"- S.S.D. CHIM/02 "Chimica fisica" ora CHEM-02/A "Chimica fisica", nominata con Decreto Rettorale n. 2176/2024 prot. 249154 in data 19/09/2024 in data 19/09/2024, i cui nominativi sono stati resi pubblici sul sito web istituzionale dell'Ateneo di Parma, così composta:

*Prof. Roberto CAMMI Professore di prima fascia presso l'Università degli Studi di Parma*

*Prof.ssa Cristina MENZIANI, Professoressa di prima fascia presso l'Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia*

*Prof. Luca MUCCIOLI, Professore di seconda fascia presso l'Università degli Studi di Bologna*

si riunisce al completo, per via telematica, il giorno 2 ottobre 2024 alle ore 15:30, salvo eventuali rikusazioni che dovessero pervenire, per procedere alla valutazione dell'adeguatezza dell'attività di ricerca e di didattica svolta in relazione a quanto stabilito nel contratto che si intende prorogare.

In apertura di seduta, ciascun commissario dichiara di non trovarsi in rapporto di incompatibilità, affinità o parentela, entro il quarto grado incluso, con gli altri componenti della Commissione e che non sussistono le cause di astensione, previste dagli artt. 51 e 52 del c.p.c., nonché le situazioni previste dall'art. 35-bis del Decreto Legislativo 30.03.2001, n. 165, così come introdotto dalla Legge 6.11.2012, n. 190.

Ciascun Commissario, presa visione del nominativo del Ricercatore da sottoporre a valutazione, dichiara:

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

Si provvede quindi alla nomina del Presidente nella persona del Prof. Maria Cristina Menziani e del Segretario nella persona del Prof. Roberto Cammi.

Il Presidente da lettura delle disposizioni di legge e delle relative norme che la Commissione è tenuta ad osservare nello svolgimento dei lavori.

Sulla base della documentazione pervenuta ai singoli Commissari, la valutazione si riferisce a:

Dott. Francesco DI MAIOLO Presso l'Università degli Studi di Parma nel periodo dal 31.12.2021 al 31.12.2024

La Commissione, dopo aver preso visione della relazione sull'attività del ricercatore, redatta, secondo quanto disposto dal D.M. 242 del 24.05.2011, dal Dipartimento al quale afferisce il candidato (Dipartimento di Scienze Chimiche, della Vita e della Sostenibilità Ambientale dell'Università degli Studi di Parma), sintetizza così il profilo curricolare del candidato:

Il profilo curricolare del candidato riguarda sia l'attività di ricerca che l'attività didattica e le altre attività ad esse connesse svolte dal candidato nel triennio 2022-2024, in cui egli ha ricoperto il ruolo di RTD A presso il Dipartimento SCVSA dell'Università di Parma a partire dal 1° gennaio 2022 e continuativamente fino ad oggi.

Per quanto riguarda l'attività didattica (a.a. 2022-23, 2023-24), il Dr. Di Maiolo ha tenuto il corso teorico di lezioni frontali intitolato "Energia e transizione ecologica, oltre il mito la scienza" nell'ambito del corso di Laurea in Chimica, con 24 ore di lezioni frontali pari a 3 CFU. Inoltre nello stesso periodo il candidato ha tenuto un modulo di esercitazioni per l'insegnamento di Chimica fisica dei Materiali (12h, 1 CFU) per il Corso di Laurea in Scienze dei Materiali. È stato inoltre relatore di quattro tesi di Laurea triennale in Chimica.

L'attività di ricerca del candidato si è articolata in due principali ambiti di ricerca entrambi riconducibili al campo della chimica teorica dei sistemi complessi.

Un primo ambito di ricerca ha riguardato lo studio della struttura elettronica di stati eccitati di cromofori organici sia di sistemi TADF che più in generale di sistemi con applicazioni OLED. In particolare, il candidato ha proposto un modello basato sulla teoria dei multi-corpi applicata al modello Parriser-Parr-Pople per lo studio della struttura elettronica di una classe di trianguleni variamente sostituiti, caratterizzati da stati eccitati con una inversione singoletto e tripletto. Il candidato ha anche proposto un originale utilizzo del modello PPP per lo studio della fotofisica di vari radicali organici per prevederne in modo efficace le proprietà emissive OLED. Sempre nell'ambito dei cromofori organici per OLED, il candidato ha utilizzato diversi metodi computazionali per stati eccitati (PPP, Coupled-Cluster, CASCF, CASPT2) per lo studio delle proprietà emissive di nanografeni variamente drogati.

Il secondo ambito dell'attività di ricerca del candidato ha riguardato lo studio teorico di sistemi complessi. Il tema centrale è quello della descrizione della dinamica di stato eccitato di un cromoforo a trasferimento di carica accoppiata alla dinamica di un solvente polare. In questi studi il candidato utilizza nuovi approcci teorici basati sia sulle equazioni gerarchiche del moto (HEOM), sia su generalizzazioni classico-quantistiche delle equazioni idrodinamiche di Navier-Stokes. Questo ambito di ricerca è condotto in collaborazione con la prof.ssa Irene Burghardt della Goethe University di Francoforte.

L'attività di ricerca del candidato è documentata da 8 pubblicazioni su riviste internazionali e da due preprint apparsi su Chemrxiv. In queste pubblicazioni il candidato compare per quattro volte come corresponding author.

Il candidato ha diverse collaborazioni internazionali, e per quanto riguarda la partecipazione a progetti di ricerca si segnala che risulta come PI in due progetti (Bando di ricerca conferito da UNiPr, progetto HPC conferito dal Cineca) e come collaboratore in due progetti di ricerca internazionali ("Quantum-Classical Hydrodynamics" University of Surrey-Goethe University, e IRC, Kyoto University). Sempre in ambito internazionale il candidato ha tenuto conferenze su invito.

Il candidato è membro dell'Editorial board di Frontiers Chemistry e ha svolto attività di referaggio per diverse riviste scientifiche internazionali.

Infine, il candidato ha svolto svariate attività di public engagement organizzate dal Dipartimento SCVSA.

Successivamente i commissari procedono a formulare i seguenti giudizi individuali del profilo curriculare:

Giudizio Prof. Roberto CAMMI

Il candidato presenta un'attività di ricerca nel campo della chimica teorica dei sistemi complessi pienamente coerente con il SSD CHEM-02/A. Questa attività è eccellente sia per la varietà dei temi trattati che per la capacità del candidato di proporre nuove e originali metodologie teoriche. Anche l'attività didattica è pienamente coerente con il settore CHEM-02/A. Pertanto, il candidato risulta pienamente idoneo alla proroga biennale del contratto RTDa - SSD CHEM-02/A

Giudizio Prof.ssa Cristina MENZIANI

L'attività di ricerca del candidato riguarda principalmente lo sviluppo di metodologie teoriche per lo studio di sistemi complessi ed è eccellente e pienamente coerente con il SSD CHEM-02/A. L'attività didattica erogata e l'attività di tutoraggio di tesi di laurea triennale sono coerenti con il SSD CHEM-02/A. Pertanto, il candidato è pienamente idoneo alla proroga biennale del contratto RTDa - SSD CHEM-02/A.

Giudizio Prof. Luca MUCCIOLI

Sia l'attività didattica che l'attività di ricerca del candidato sono completamente coerenti con le tematiche del settore scientifico disciplinare SSD CHEM-02/A. L'attività di ricerca, di ottima qualità e rigore metodologico, risulta particolarmente originale nell'approccio teorico proposto per modellare e interpretare la fotofisica di cromofori in matrici organiche. Si ritiene dunque il candidato pienamente idoneo alla proroga biennale del contratto RTDa - SSD CHEM-02/A.

Infine, dopo ampia e approfondita discussione e sulla base del confronto delle valutazioni singolarmente espresse da ciascun Commissario, la commissione esprime il seguente giudizio collegiale:

L'attività di ricerca del candidato nel campo della chimica teorica dei sistemi complessi è eccellente e pienamente coerente con il SSD CHEM-02/A. L'attività didattica erogata e l'attività come relatore di tesi di laurea triennale sono altresì coerenti con il SSD CHEM-02/A. Pertanto, il candidato è pienamente idoneo alla proroga biennale del contratto RTDa - SSD CHEM-02/A.

Alle ore 16:30 la Commissione considera conclusi i lavori e dà mandato al Segretario verbalizzante di inoltrare il presente verbale, unitamente alle dichiarazioni di adesione dei restanti membri, acquisite dallo stesso, al Rettore dell'Università degli Studi di Parma (protocollo@unipr.it), affinché possa procedere, secondo le disposizioni ministeriali, ai successivi adempimenti.

Letto, approvato e sottoscritto seduta stante

LA COMMISSIONE:

Prof.ssa Maria Cristina Menziani  
Prof. Luca Muccioli  
Prof. Roberto Cammi

PRESIDENTE  
COMPONENTE  
SEGRETARIO