

PROCEDURA PUBBLICA DI SELEZIONE PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 UNITÀ DI PERSONALE RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO IN TENURE TRACK, AI SENSI DELL'ART 24, DELLA LEGGE 30.12.2010, N. 240, PRESSO IL DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, DELLA VITA E DELLA SOSTENIBILITÀ AMBIENTALE PER IL G.S.D. 03/CHEM-02 "Chimica fisica", PROFILO: S.S.D. CHEM-02/A "Chimica fisica", INDETTA CON D.R. N. 1822/2025 prot. 309743 del 31.10.2025, IL CUI AVVISO DI BANDO È STATO PUBBLICATO NELLA G.U. – IV SERIE SPECIALE N. 90 del 18.11.2025

RELAZIONE FINALE

La Commissione giudicatrice della procedura pubblica di selezione in oggetto, nominata con D.R. n. 21/2026 prot. 7895 del 09.01.2026, composta da:

Prof.ssa Francesca TERENZIANI	Professoressa di prima fascia presso l'Università di Parma;
Prof. Luigi PADUANO	Professore di prima fascia presso l'Università degli Studi di Napoli "Federico II";
Prof. Gabriele D'AVINO	Professore di seconda fascia presso l'Università Ca' Foscari Venezia

si riunisce al completo, per via telematica, il giorno 19/03/2026 alle ore 16:30 per la stesura della relazione finale.

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

- il giorno 03/02/2026 alle ore 12:00 per la determinazione dei criteri di valutazione;
- i giorni 19/02/2026 alle ore 14:30 e 23/02/2026 alle ore 14:30 per la valutazione preliminare dei titoli, del curriculum e della produzione scientifica;
- il giorno 17/03/2026 alle ore 9:30 per la discussione dei titoli, della produzione scientifica ed accertamento della conoscenza della lingua inglese;
- il giorno 17/03/2026 alle ore 14:30 per l'attribuzione dei punteggi ai titoli, al curriculum ed alla produzione scientifica;
- il giorno 19/03/2026 alle ore 16:30 per la stesura della relazione finale.

Nella prima riunione dello 03/02/2026, ciascun Commissario ha preliminarmente dichiarato di non trovarsi in rapporto di incompatibilità, affinità o parentela, entro il quarto grado incluso, con gli altri componenti della Commissione e che non sussistono le cause di astensione previste dagli art. 51 e 52 del c.p.c., nonché le situazioni previste dall'art. 35-bis del Decreto Legislativo 30.3.2001, n. 165, così come introdotto dalla Legge 6.11.2012, n. 190.

Quindi la Commissione ha provveduto ad eleggere il Presidente nella persona del Prof. Luigi PADUANO ed il Segretario nella persona della Prof.ssa Francesca TERENZIANI.

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

Valutazione dei titoli e del curriculum

- a) dottorato di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'estero;
- b) eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero;
- c) documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri;
- d) documentata attività in campo clinico relativamente ai Settori Concorsuali nei quali sono richieste tali specifiche competenze;
- e) realizzazione di attività progettuale relativamente ai Settori Concorsuali nei quali è prevista;
- f) organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi;
- g) titolarità di brevetti relativamente ai Settori Concorsuali nei quali è prevista;
- h) relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali;
- i) premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca;

j) diploma di specializzazione europea riconosciuto da Board internazionali, relativamente a quei Settori Concorsuali nei quali è prevista.

La valutazione di ciascun titolo è effettuata considerando specificamente la significatività che esso assume in ordine alla qualità e quantità dell'attività di ricerca svolta dal singolo candidato.

La Commissione, considerate le caratteristiche del Gruppo scientifico-disciplinare oggetto del bando, non terrà conto dei criteri previsti ai punti d), e), j).

Valutazione della produzione scientifica

La Commissione giudicatrice, nell'effettuare la valutazione comparativa dei candidati, prenderà in considerazione esclusivamente pubblicazioni o testi accettati per la pubblicazione secondo le norme vigenti nonché saggi inseriti in opere collettanee e articoli editi su riviste in formato cartaceo o digitale con l'esclusione di note interne o rapporti dipartimentali. La tesi di dottorato o titoli equipollenti, saranno presi in considerazione anche in assenza delle condizioni sopra menzionate.

La valutazione sarà effettuata sulla base dei seguenti criteri:

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica;
- b) congruenza di ciascuna pubblicazione con il Gruppo scientifico-disciplinare per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più Settori Scientifico-disciplinari, ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate;
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica;
- d) determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione.

Saranno valutati altresì la consistenza complessiva della produzione scientifica del candidato, l'intensità e la continuità temporale della stessa, fatti salvi i periodi, adeguatamente documentati, di allontanamento non volontario dall'attività di ricerca, con particolare riferimento alle funzioni genitoriali.

Nell'ambito dei Settori Concorsuali in cui ne è consolidato l'uso a livello internazionale la Commissione, nel valutare le pubblicazioni, si avvale anche dei seguenti indicatori, riferiti alla data di scadenza dei termini delle candidature:

- a) numero totale delle citazioni;
- b) numero medio di citazioni per pubblicazione;
- c) «impact factor» totale;
- d) «impact factor» medio per pubblicazione;
- e) combinazioni dei precedenti parametri atte a valorizzare l'impatto della produzione scientifica del candidato (indice di Hirsch o simili).

La verifica dell'adeguata conoscenza della lingua inglese, richiesta nel bando, avverrà secondo il seguente criterio: parte del colloquio avverrà in lingua inglese.

In conformità a quanto previsto dall'art. 9 del bando, avvalendosi dei criteri ministeriali sopra indicati, attribuirà ai titoli e a ciascuna pubblicazione i seguenti punteggi:

- titoli e curriculum: fino ad un massimo di punti 40
- produzione scientifica: fino ad un massimo di punti 60

TITOLI E CURRICULUM, fino ad un massimo di 40 punti:

Dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'Estero;	punti da 0 fino a 10
attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero, in relazione alla durata	punti da 0 fino a 7

attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri;	punti da 0 fino a 8
organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	punti da 0 fino a 5
titolarità di brevetti	punti da 0 fino a 1
attività di relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali;	punti da 0 fino a 7
conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	punti da 0 fino a 2

TOTALE

40

PRODUZIONE SCIENTIFICA, fino ad un massimo di 60 punti:

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica	Congruenza di ciascuna pubblicazione con il G.S.D. per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più S.S.D. ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica	Determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione	Eventuali indicatori per i settori nei quali ne è consolidato l'uso a livello internazionale di cui al comma 4 dell'art. 3 del DM	TOTALE
Pubblicazioni su riviste nazionali e internazionali	Max 0.3 punti	Max 1.2 punti	Max 1 punto	Max 1 punto	Max 0.5 punti	Max 4 punti per ciascuna pubblicazione
Monografie	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0
Interventi a convegni con pubblicazione degli atti	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0
Saggi inseriti in opere collettanee	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0
Abstract	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0	Punti 0
Consistenza complessiva della produzione scientifica, intensità e continuità temporale						Max 12 punti

TOTALE

60

Il giudizio finale sarà considerato positivo se il candidato avrà conseguito:

- un punteggio pari almeno alla metà del massimo attribuibile nella valutazione delle pubblicazioni scientifiche secondo quanto disposto nel bando (30);
- una valutazione complessiva almeno pari a 70/100;

In caso di più candidati selezionati con giudizio finale positivo, la Commissione, tenuto conto del punteggio minimo di cui sopra, individuerà il vincitore e formulerà una graduatoria di merito, così come previsto nel bando.

In seguito, il Segretario, delegato dal Presidente, ha consegnato al Responsabile del procedimento concorsuale, Dott.ssa Marina Scapuzzi, il verbale n. 1 "Criteri di valutazione", per la pubblicazione sul sito di Ateneo, nella pagina riservata ai concorsi.

Nella seconda riunione del 19/02/2026 e 23/02/2026, relativa alla valutazione preliminare dei titoli, dei curricula e della produzione scientifica dei candidati, la Commissione ha preso visione dell'elenco di coloro che hanno prodotto istanza di partecipazione alla selezione, che sono risultati essere:

- 1) 2427654
- 2) 2429107
- 3) 2434030
- 4) 2448352
- 5) 2450387
- 6) 2452547
- 7) 2452754
- 8) 2454167
- 9) 2454438
- 10) 2454924
- 11) 2455124
- 12) 2455689
- 13) 2456523

Ciascun Commissario ha, pertanto, dichiarato:

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

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

Terminata la valutazione preliminare, sono stati ammessi alla discussione pubblica dei titoli e della produzione scientifica, con la Commissione, in percentuale compresa tra il 10 e il 20 per cento del numero dei candidati e comunque non inferiore a sei unità, i seguenti candidati:

2448352
2450387
2452754
2454438
2454924
2455689

Nella terza riunione, svoltasi in data 17/03/2026, la Commissione si è riunita per procedere alla discussione pubblica con i candidati, dei titoli e della produzione scientifica e all'accertamento della conoscenza della lingua inglese.

La Commissione ha preso visione dei candidati ammessi alla discussione pubblica dei titoli e della produzione scientifica e all'accertamento della conoscenza della lingua inglese, i cui codici identificativi sono i seguenti:

2448352
2450387
2452754
2454438
2454924
2455689

Si sono presentati a sostenere il colloquio i seguenti candidati:

2448352
2450387
2452754
2454438
2454924
2455689

Nessun candidato è risultato assente.

Nella quarta riunione del 17/03/2026 la Commissione ha effettuato la valutazione dei titoli, del curriculum e della produzione scientifica dei candidati, presenti alla discussione con la stessa, in conformità ai criteri ed ai parametri determinati nella prima riunione, predisponendo per ognuno un prospetto in cui sono stati riportati i punteggi, attribuiti all'unanimità, ai titoli, a ciascuna pubblicazione presentata, nonché un giudizio relativo all'accertamento della lingua inglese (allegati da 1 a 6).

Sulla base dei punteggi complessivi assegnati, la Commissione, all'unanimità, avendo i candidati riportato un punteggio complessivo pari almeno alla metà del massimo attribuibile nella valutazione delle pubblicazioni scientifiche secondo quanto disposto nel bando, nonché una valutazione complessiva almeno pari a 70 su 100, ha individuato 2450387 quale vincitore della presente selezione pubblica e, nel contempo, ha stilato la sotto riportata graduatoria di merito:

- 1) 2450387;
- 2) 2448352;
- 3) 2454924;
- 4) 2455689;
- 5) 2452754.

Alle ore 17:45 la Commissione, terminati i lavori, toglie la seduta.

Letto, approvato e sottoscritto digitalmente.

LA COMMISSIONE:

Prof. Luigi PADUANO, PRESIDENTE

Prof. Gabriele D'AVINO, COMPONENTE

Prof.ssa Francesca TEREZIANI, SEGRETARIO

ALLEGATO A

PROCEDURA PUBBLICA DI SELEZIONE PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 UNITÀ DI PERSONALE RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO IN TENURE TRACK, AI SENSI DELL'ART 24, DELLA LEGGE 30.12.2010, N. 240, PRESSO IL DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, DELLA VITA E DELLA SOSTENIBILITÀ AMBIENTALE PER IL G.S.D. 03/CHEM-02 "Chimica fisica", PROFILO: S.S.D. CHEM-02/A "Chimica fisica", INDETTA CON D.R. N. 1822/2025 prot. 309743 del 31.10.2025, IL CUI AVVISO DI BANDO È STATO PUBBLICATO NELLA G.U. – IV SERIE SPECIALE N. 90 del 18.11.2025

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

Candidato: 2427654

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un curriculum incentrato sulla chimica fisica teorico-computazionale, con PhD alla Scuola Normale Superiore (2022, con lode) su strategie computazionali per la descrizione accurata di termochimica e cinetica di reazioni in fase gas. Dopo un periodo come post-doc al Trinity College Dublin, dal 2025 è ricercatore a tempo determinato presso CNR-ICCOM (ThC2-Lab), con attività su progettazione computazionale per la valorizzazione di biomasse e chimica sostenibile. L'attività progettuale consiste soprattutto nell'ottenimento di tempo computazionale e la partecipazione a progetti nazionali strategici.

Il candidato ha presentato alcuni contributi a conferenze nazionali e internazionali, sia come poster che come comunicazioni orali.

L'attività didattica universitaria si limita al tutoraggio e all'assistenza di laboratorio.

Nel complesso, il curriculum è congruente col SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica del candidato risulta coerente e continuativa, con 19 articoli su riviste *peer-reviewed* internazionali. Risulta primo autore o autore di riferimento in un numero limitato di pubblicazioni.

Le pubblicazioni riguardano la modellistica quantomeccanica, la cinetica di reazioni chimiche, i processi di pirolisi di biomasse e lo sviluppo di metodi avanzati per lo studio della reattività molecolare.

La collocazione editoriale è discreta e copre sia riviste tipiche del SSD CHEM-02/A, sia riviste di ambito astrofisico.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione non ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto non lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2429107

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato ha conseguito il PhD in Chimica Analitica (Univ. Tunis, 2024) dopo una formazione interamente orientata alla chimica analitica e ambientale, con competenze maturate in tecniche di caratterizzazione (HPLC, TOC, FTIR, UV-Vis, SEM, XRD, BET, TGA) e nel trattamento di effluenti tramite adsorbimento ed elettrolisi. Ha svolto *internship* di ricerca presso laboratori in Tunisia, Palermo e Torino, lavorando su elettrodi funzionali e processi di degrado elettrochimico di contaminanti. È presente esperienza anche come tecnico analitico nel controllo dei materiali a contatto con gli alimenti. La partecipazione a congressi internazionali è documentata da 3 poster nell'ambito della chimica ambientale ed elettrochimica applicata.

Nel complesso, il curriculum mostra una formazione solida nella chimica analitico-ambientale con prevalenza di attività sperimentali applicate. L'aderenza ai contenuti del SSD CHEM-02/A risulta solo parziale.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica include 3 articoli *peer-reviewed* (2023–2025), incentrati sulla degradazione elettrochimica e sull'adsorbimento di contaminanti organici mediante materiali carboniosi dopati, in coerenza con il suo profilo sperimentale. Risulta primo autore nelle tre pubblicazioni presentate.

Nel complesso, la produzione è coerente con l'ambito analitico ambientale, mentre il contributo ai temi disciplinari del SSD CHEM-02/A appare limitato.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione non ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto non lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2434030

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un percorso formativo coerente, focalizzato sulla chimica teorica e computazionale dello stato solido. Ha conseguito il PhD *cum laude* all'Università di Torino (2022), con una tesi incentrata sullo sviluppo di metodi *ab initio* caratterizzati da basso costo computazionale e sulla loro applicazione allo studio di materiali cristallini e MOF. Ha svolto brevi periodi di ricerca all'estero (UCL London; INST Mohali) ed è stato assegnista presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino, dove, dal 2025, è Tecnologo di Ricerca.

Ha ottenuto il Premio Tesi Magistrale "Pier Luigi Nordio" (SCI, 2019).

L'attività congressuale include un discreto numero di presentazioni orali in conferenze nazionali e internazionali.

L'attività didattica si limita ad esercitazioni di chimica computazionale all'interno di insegnamenti universitari.

Nel complesso emerge una buona preparazione congruente col SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica è ampia e continuativa, congruente con le tematiche del SSD CHEM-02/A, composta da 23 articoli, focalizzati su metodi DFT/HF compositi, modellistica dello stato solido e proprietà funzionali dei MOF, con risultati che uniscono aspetti metodologici e applicativi, inclusi lavori sullo sviluppo e sull'ottimizzazione HPC del codice CRYSTAL. La collocazione editoriale è buona.

Risulta primo autore in un numero limitato di pubblicazioni e non appare mai come autore di riferimento.

Nel complesso, la produzione riflette una discreta autonomia scientifica.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione non ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto non lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2448352

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un percorso formativo di elevato profilo per il settore della chimica fisica teorica. Ha conseguito il PhD alla Technische Universität München *summa cum laude*, nell'ambito della International Max Planck School for Advanced Photon Science. La sua carriera si è sviluppata con continuità attraverso posizioni post-doc in Germania e Paesi Bassi e, attualmente, come ricercatore presso l'Università Heinrich-Heine di Düsseldorf. Il profilo mostra competenze avanzate nello sviluppo di metodi per la dinamica quantistica ad alta dimensionalità, nella teoria dei sistemi quantistici aperti, nella simulazione di processi fotoindotti e nella modellizzazione di spettroscopie avanzate.

Ha partecipato ad un discreto numero di progetti di ricerca. Si evidenzia la selezione alla seconda fase del bando ERC Starting Grant, con valutazioni scientifiche eccellenti.

Il candidato ha inoltre tenuto numerose presentazioni su invito e comunicazioni orali in sedi internazionali di rilievo e ha partecipato con continuità a conferenze di settore.

Ha svolto ampia attività didattica in corsi magistrali e PhD in Germania e nei Paesi Bassi, con diversi cicli come titolare o co-titolare degli insegnamenti, e supervisione di studenti.

Nel complesso, il curriculum mostra maturità scientifica, continuità nei temi chiave del settore e un profilo metodologico avanzato, pienamente pertinente al SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica è ampia, coerente e continuativa, con 30 articoli indicizzati, in numerosi dei quali il candidato è primo autore o autore di riferimento, testimoniando un ruolo scientifico centrale. Tre pubblicazioni lo riportano come unico autore. I contributi riguardano temi cardine della chimica fisica teorica: dinamica nonadiabatica, fotochimica ultrarapida, spettroscopie risolte nel tempo, modellizzazione quantistica avanzata e metodi semiclassici. I contributi mostrano rigore metodologico e autonomia. La collocazione editoriale è buona.

Nel complesso, la produzione risulta pienamente congruente col SSD CHEM-02/A.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2450387

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un percorso pienamente coerente e di elevato profilo rispetto al SSD CHEM-02/A, con formazione in chimica teorica all'Università di Parma (LT e LM, PhD *summa cum laude*). Dopo periodi di ricerca pre- e post-dottorali a Parma, ha ricoperto posizioni di ricercatore post-doc presso la Goethe Universität Frankfurt (inclusa una Alexander von Humboldt Fellowship, 2020–2022). Dal 2022 è RTD presso l'Università di Parma. La sua attività di ricerca si concentra sulle tematiche della dinamica nonadiabatica, del rilassamento in sistemi quantistici aperti e dei modelli a elettroni interagenti, con applicazioni alla descrizione di cromofori e materiali organici funzionali. Ha maturato riconoscimenti ed esperienze significative, tra cui: Premio SCI Miglior Articolo 2020, invito all'intervista ERC Starting Grant 2025 con valutazione A, attività di esperto valutatore per la Commissione Europea e la responsabilità scientifica di diversi progetti competitivi.

L'attività congressuale è ampia, con numerose comunicazioni orali e presentazioni su invito in conferenze nazionali e internazionali e in sedi internazionali di rilievo.

Le attività didattiche includono la titolarità di numerosi corsi frontali, moduli avanzati e supervisione di tesi triennali, magistrali e di tre dottorandi, oltre al ruolo di RAQ della LM in Chimica.

Nel complesso, il curriculum evidenzia continuità, autonomia avanzata, capacità progettuale e forte collocazione nei temi propri del SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica del candidato è ampia, coerente e continuativa, con 22 articoli *peer-reviewed*, tra cui pubblicazioni su invito e cover papers. La percentuale elevata di lavori come primo autore o autore di riferimento testimonia un ruolo scientifico centrale. Le linee principali della produzione scientifica riguardano la dinamica nonadiabatica di stato eccitato, la fotofisica di materiali organici emissivi, fenomeni vibronici e la modellizzazione multiscala di cromofori e materiali organici. I contributi mostrano rigore metodologico e autonomia. La produzione ha ottenuto riconoscimenti specifici, tra cui il Premio SCI Miglior Articolo 2020. La collocazione editoriale è molto buona. Nel complesso, la produzione risulta pienamente congruente con il SSD CHEM-02/A.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2452547

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un percorso formativo e professionale ampiamente interdisciplinare, con una formazione iniziale in biologia e biotecnologie mediche (LM e PhD 2010), successivamente ampliata da un secondo dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (Tor Vergata, 2025, eccellente con lode) con una tesi in modellistica computazionale di molecole organiche. Ha svolto diversi assegni di ricerca e attualmente è assegnista di ricerca presso l'Università di Tor Vergata, impegnato in studi spettroscopici e computazionali su coloranti organici.

Il profilo mostra una forte componente sperimentale e biochimica e un recente consolidamento nella chimica computazionale applicata alla biochimica e alle biotecnologie.

La disseminazione comprende comunicazioni orali e poster presso convegni prevalentemente nazionali.

L'attività didattica universitaria è presente, seppure limitata a precorsi ed esercitazioni in corsi di base, o ad ambiti non congruenti col settore concorsuale.

Nel complesso, il curriculum evidenzia una preparazione solida nei settori biochimico, della chimica dei materiali e della modellistica applicata, con un'aderenza solo parziale alle tematiche del SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

Il candidato è autore di 27 articoli indicizzati, di cui 6 come primo autore e un contributo come autore di riferimento. Le pubblicazioni coprono settori eterogenei: biochimica e biologia molecolare; chimica dei materiali e rivestimenti funzionali; chimica computazionale applicata; applicazioni biochimiche e organiche. Più recentemente, la produzione si concentra sulla modellistica DFT, con risultati pubblicati su riviste ben indicizzate.

La continuità nella produzione scientifica non è uniforme nel tempo.

Pur mostrando una produzione robusta e variegata, la rilevanza specifica per il SSD CHEM-02/A rimane limitata.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione non ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto non lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2452754

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un profilo marcatamente orientato alla chimica fisica teorico-computazionale di materiali e interfacce. Le esperienze di ricerca comprendono il PhD allo Stephenson Institute, Univ. Liverpool, su simulazioni *large-scale* di nanotubi inorganici, post-doc presso ICTP (Trieste), Senior Computational Scientist presso STFC Rutherford Appleton Laboratory (UK), post-doc Univ. Bologna; dal 2023 è RTD presso Univ. Padova. Il percorso integra sviluppo metodologico e algoritmico e applicazioni a stati eccitati, magnetismo, interfacce metallo-organiche, interfacce ossido/acqua per catalisi/elettrochimica. È co-sviluppatore del codice ONETEP e collabora allo sviluppo di QuantumMatchaTea. Ha ottenuto consistenti risorse HPC tramite assegnazione competitiva.

Il candidato riporta alcune presentazioni orali a conferenze internazionali (tra cui un invito) e un buon coinvolgimento in progetti competitivi.

Ha svolto attività didattica integrativa e di supervisione di tesi.

Nel complesso, il profilo del candidato è metodologicamente forte e tecnicamente autorevole, congruente col SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione è cospicua e continuativa, con 19 articoli pubblicati su riviste internazionali *peer-reviewed*, di cui 6 come autore principale. I contributi coprono le tematiche di struttura elettronica, stati eccitati, magnetismo, interazioni acqua/superfici e dinamiche a scala estesa; una quota rilevante riguarda l'integrazione tra HPC, *machine learning* e tecniche di *quantum computing*.

Nel complesso, la produzione evidenzia continuità e impianto metodologico avanzato, con un posizionamento pienamente centrato su tematiche congruenti col SSD CHEM-02/A, e una maturità scientifica già ben definita, ulteriormente valorizzata dall'attività di sviluppo software.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2454167

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato ha completato il PhD in Scienze Chimiche all'Università di Torino (2025), con una tesi su sensori e materiali per sistemi alimentari sostenibili, dopo un Bachelor e un MPhil in Chemistry (Pakistan) focalizzati su chimica tessile, chimica dei coloranti e tecniche analitiche. Il percorso mostra buona padronanza sperimentale in nanomateriali metallici, tecniche spettroscopiche (SERS, UV-Vis) e caratterizzazione morfologica (SEM-EDS, XRD). Le esperienze comprendono attività di ricerca su *remediation*, *sensing* e materiali porosi metallici.

Ha partecipato a seminari, scuole e simposi in ambiti di chimica dei materiali, metallurgia e tecniche analitiche.

Non presenta esperienze didattiche rilevanti, eccetto l'assistenza a due studenti durante i progetti di tesi BSc e MSc.

Il profilo, seppur di qualità, presenta un orientamento prevalente verso la chimica dei materiali, analitica e tessile, con un allineamento solo marginale alle tematiche tipiche del SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

Il candidato è autore di 6 articoli *peer-reviewed*, con contributi su metalli nanoporosi per applicazioni come substrati SERS, e per la degradazione di coloranti. La produzione riflette competenze nel design di materiali metallici funzionali e nei processi di trattamento/analisi di coloranti e contaminanti.

Nel complesso, la produzione è solo parzialmente sovrapponibile alle tematiche del SSD CHEM-02/A.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione non ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto non lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2454438

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato ha conseguito il PhD in Scienze Chimiche e Ambientali con lode (Università degli Studi dell'Insubria, 2020), sviluppando simulazioni *coarse-grained* e metodi statistici per polielettroliti in soluzione. Ha successivamente svolto attività post-doc e assegni di ricerca presso istituzioni qualificate (Southern Methodist University, Insubria, SISSA, Università di Genova), lavorando su materiali nanoporosi, complessità topologica in copolielettroliti, cromatografia quantistica e simulazioni mesoscalari di membrane fotosintetiche. Le competenze tecniche includono metodi di dinamica molecolare, Monte Carlo, *enhanced sampling*, nonché calcoli di struttura elettronica.

La presenza in conferenze specialistiche e workshop nazionali ed internazionali è discreta, con alcune presentazioni orali e poster.

Ha svolto attività di assistenza alla didattica universitaria (2019–2021) e co-supervisiona una tesi di dottorato presso l'Università di Genova.

Nel complesso, il percorso mostra una specializzazione metodologica solida, coerente con le tematiche tipiche del SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica è ampia e continuativa, caratterizzata da 23 articoli *peer-reviewed* in riviste rilevanti per chimica fisica, polimeri e interfacce, in cui risulta ben evidente il contributo del candidato; risulta diverse volte primo autore o autore di riferimento. I contributi riguardano principalmente polielettroliti, interazioni elettrostatiche, *self-assembly*, interfacce solido-liquido e simulazioni *coarse-grained* di materia soffice.

La produzione scientifica ha una buona collocazione editoriale e mostra una coerenza disciplinare elevata, con una collocazione pienamente congruente con i temi del SSD CHEM-02/A.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2454924

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta formazione in chimica (LT/LM, Univ. Bologna) e PhD alla Scuola Normale Superiore (2017–2022, con lode) su metodi quantomeccanici ad elevata accuratezza applicati a spettroscopia (roto)vibrazionale, interazioni deboli e reattività in fase gas (astrochimica/chimica dell'atmosfera). Assegnista di ricerca prima alla SNS (2022–2023) e poi all'Università di Bologna (dal 2023), ha contribuito allo sviluppo di metodi computazionali originali, e partecipato a studi teorico-sperimentali presso grandi infrastrutture di ricerca (SOLEIL/FELIX/SRT). Ha recentemente conseguito l'abilitazione scientifica nazionale.

Svolge attività di supporto alla didattica in maniera continuativa dal 2022.

Il profilo risulta pienamente coerente con il SSD CHEM-02/A, con una marcata specializzazione in ambito spettroscopico e metodologico, e mette in luce un buon livello di autonomia e di maturità scientifica.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica è molto ampia e continuativa, costituita da 46 pubblicazioni indicizzate, includendo 14 lavori da primo autore e diversi contributi in qualità di (co)autore di riferimento. Le pubblicazioni mostrano apporti significativi allo sviluppo di schemi compositi ad elevata accuratezza, alla caratterizzazione strutturale e alla spettroscopia (roto)vibrazionale, nonché allo studio della reattività in fase gas in contesti interstellari e atmosferici. La collocazione editoriale è discreta e copre sia riviste tipiche del settore, sia riviste di ambito astrofisico.

L'attività di disseminazione è documentata e costante, con numerose comunicazioni su invito in convegni nazionali e internazionali. Nel complesso, la produzione evidenzia solidità metodologica e maturità scientifica, risultando adeguata ai requisiti del settore CHEM-02/A.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2455124

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un Dottorato di Ricerca in Chimica (Università di Salerno), cui si aggiunge un secondo Dottorato in Bioinformatica e Biologia Computazionale (Federico II di Napoli, 2013). Le esperienze di ricerca includono contratti presso le Università di Napoli e Salerno, attività post-dottorale su proprietà chiro-ottiche, e un ruolo di RTD al CNR-IMM dal 2024, con attività su difetti di spin per applicazioni in tecnologie quantistiche. Nel complesso, il curriculum mostra una lunga e articolata esperienza nel campo della chimica teorica e della spettroscopia computazionale, con competenze consolidate nei metodi *ab initio* e, più recentemente, nell'ambito della microelettronica quantistica.

Il curriculum riporta diversi contributi a congressi, in cui non sempre sono chiari la tipologia di presentazione e il ruolo del candidato.

Non viene riportata alcuna attività didattica universitaria.

Le attività di ricerca universitarie e CNR sono pienamente coerenti col SSD CHEM-02/A, caratterizzate tuttavia da prolungata interruzione per insegnamento nella scuola secondaria.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica comprende 20 pubblicazioni su riviste internazionali *peer-reviewed*, con buona continuità negli anni 2000–2006 e una ripresa recente in ambito CNR-IMM. Le pubblicazioni trattano tematiche congruenti con il SSD CHEM-02/A: proprietà di risposta molecolare, proprietà magnetiche e aromaticità, spettroscopia teorica e difetti di spin in materiali semiconduttori per tecnologie quantistiche. La collocazione editoriale è buona. Il numero di pubblicazioni in cui compare come primo autore o autore di riferimento è molto limitato.

Complessivamente, la produzione risulta coerente con le tematiche del SSD CHEM-02/A, con un nucleo forte nella teoria dei fenomeni di risposta e una recente estensione verso simulazioni *ab initio* per materiali quantistici, sebbene sia penalizzata dal lungo periodo di interruzione dell'attività di ricerca.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione non ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto non lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2455689

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato ha ottenuto il perfezionamento/PhD alla Scuola Normale Superiore (2021, lode) e attualmente è RTD presso la SNS (dal 12/2022) con un percorso pienamente congruente al SSD CHEM-02/A nelle aree di spettroscopia computazionale ad alta risoluzione, struttura molecolare e termochimica/reattività in fase gas. Ha sviluppato metodologie accurate ed efficienti per la determinazione della geometria molecolare dall'analisi di spettri vibro-rotazionali. Tali metodologie sono state implementate nel software Molecular Structure Refinement (MSR), di cui è ideatore e responsabile.

La buona partecipazione a conferenze specialistiche, con inviti e comunicazioni orali, denota una visibilità scientifica consolidata.

Svolge attività didattica come docente o co-docente in corsi brevi o moduli coerenti col SSD CHEM-02/A, supervisiona tesi (LM/LT) ed è co-supervisore di assegni di ricerca; ricopre alcuni ruoli istituzionali presso SNS e SCI.

Nel complesso, il candidato presenta un profilo metodologicamente forte, con continuità di risultati e autonomia scientifica già ben delineata.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica è ampia e continuativa, comprendendo 33 pubblicazioni, di cui un discreto numero in cui il candidato è primo autore. I contributi si collocano nell'ambito della spettroscopia computazionale avanzata, con sviluppi metodologici rilevanti per la determinazione di proprietà strutturali da dati spettroscopici in fase gas. Le pubblicazioni hanno una discreta collocazione editoriale.

Nel complesso, la produzione mostra rigore metodologico e una collocazione congruente col settore CHEM-02/A.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

Candidato: 2456523

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

Giudizio collegiale:

Giudizio analitico del curriculum e dei titoli

Il candidato presenta un percorso interdisciplinare, con LM in Ingegneria dei Materiali e PhD in Physics and Nanosciences (2024, *summa cum laude*) presso UniMoRe, sviluppato su temi quali chiralità (CISS), trasporto di carica e materiali funzionali. Le sue esperienze di ricerca comprendono attività sperimentali avanzate su elettrodi chirali, dispositivi spintronici, sintesi e caratterizzazione optoelettronica, con periodi all'estero (Weizmann Institute, University of Bath). Attualmente è post-doc presso CEA Grenoble, con attività su celle elettrochimiche. Il profilo include anche attività R&D su fotovoltaico a film sottile (IMEM-CNR/Camlin) e su biomateriali funzionali.

I contributi a conferenze sono limitati.

Dal punto di vista della didattica, è titolare di un insegnamento per l'università telematica eCampus.

Nel complesso, il percorso evidenzia competenze interdisciplinari nell'ambito di materiali e dispositivi optoelettronici e spintronici, con discreta sovrapposizione con le tematiche proprie del SSD CHEM-02/A.

Giudizio analitico della produzione scientifica

La produzione scientifica è documentata a partire dal 2020, coerentemente con la giovane età accademica, ed è continuativa, comprendendo 13 articoli *peer-reviewed*. I contributi riguardano principalmente sistemi chirali, catalisi elettrochimica, materiali magnetici ed elettrodi funzionalizzati, oltre a studi applicati su fotovoltaico a film sottile, materiali a base di carbonio e dispositivi ibridi. Le tematiche della produzione scientifica sono globalmente coerenti col SSD CHEM-02/A, soprattutto per quanto riguarda la chimica fisica dei materiali.

Le pubblicazioni presentano una collocazione editoriale discreta e una buona frazione di contributi in cui il candidato è primo autore. Non risultano pubblicazioni come autore di riferimento.

Al termine:

Per quanto sopra descritto, la Commissione non ritiene il candidato comparativamente tra i sei più meritevoli e pertanto non lo ammette a sostenere la discussione dei titoli e della produzione scientifica.

ALLEGATO N. 1

Candidato: 2454924

Attribuzione punteggi ai titoli ed al curriculum, da parte dei Commissari all'unanimità, e valutazione conoscenza della lingua inglese

TITOLI E CURRICULUM	PUNTEGGI ATTRIBUITI
Dottorato di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'estero	10.00
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero	1.40
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	4.00
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi	0.50
Titolarietà di brevetti	0.00
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	7.00
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	1.70
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	24.60
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica (max 0.3 pt)	Congruenza di ciascuna pubblicazione con il G.S.D. per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più S.S.D. ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate (max 1.2 pt)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (max 1 pt)	Determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione (max 1 pt)	Eventuali indicatori per i settori nei quali ne è consolidato l'uso a livello internazionale di cui al comma 4 dell'art. 3 del DM (max 0.5 pt)	TOTALE
Gas-Phase Reactions of H ₂ CS and H ₂ CO with CN: Similarities and Differences from a Computational Study	0.30	1.00	0.80	0.73	0.20	3.03
The Semiexperimental Approach at Work: Equilibrium Structure of Radical Species	0.30	1.20	0.80	0.60	0.35	3.25
On the General Mechanism for the Gas-phase Reaction of Methanimine with a Radical Species in the	0.30	1.00	1.00	0.53	0.35	3.18

Interstellar Medium: Some Failures and an Important Success						
Computational Protocol for the Identification of Candidates for Radioastronomical Detection and Its Application to the C ₃ H ₃ NO Family of Isomers	0.30	1.20	1.00	0.60	0.35	3.45
Intersystem crossing in the entrance channel of the reaction of O(3P) with pyridine	0.30	1.20	1.00	0.30	0.50	3.30
Computational molecular spectroscopy	0.15	1.00	1.00	0.30	0.50	2.95
JunChS and junChS-F12 Models: Parameter-free Efficient yet Accurate Composite Schemes for Energies and Structures of Noncovalent Complexes	0.30	1.20	1.00	0.45	0.50	3.45
Fate of the Gas-Phase Reaction Between Oxirane and the CN Radical in Interstellar Conditions	0.30	1.00	1.00	0.90	0.20	3.40
In search of phosphorus in astronomical environments: The reaction between the CP radical (X 2 ζ +) and methanimine	0.30	1.20	1.00	0.73	0.35	3.58
Extension of the "cheap" Composite Approach to Noncovalent Interactions: The jun-ChS Scheme	0.30	1.20	1.00	0.73	0.50	3.73
Unveiling the Sulfur-Sulfur Bridge: Accurate Structural and Energetic Characterization of a Homochalcogen Intermolecular Bond	0.30	1.20	1.00	0.30	0.50	3.30

Accuracy of Rotational Parameters Predicted by High-Level Quantum-Chemical Calculations: Case Study of Sulfur-Containing Molecules of Astrochemical Interest	0.30	1.20	1.00	0.73	0.50	3.73
Consistenza complessiva della produzione scientifica, intensità e continuità temporale						12.00
PUNTEGGIO COMPLESSIVO						52.35

PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO

TITOLI E CURRICULUM	24.60
PRODUZIONE SCIENTIFICA	52.35
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	76.95

ALLEGATO N. 2

Candidato: 2450387

Attribuzione punteggi ai titoli ed al curriculum, da parte dei Commissari all'unanimità, e valutazione conoscenza della lingua inglese

TITOLI E CURRICULUM	PUNTEGGI ATTRIBUITI
Dottorato di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'estero	10.00
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero	7.00
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	8.00
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi	5.00
Titolarietà di brevetti	0.00
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	7.00
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	0.50
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	37.50
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica (max 0.3 pt)	Congruenza di ciascuna pubblicazione con il G.S.D. per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più S.S.D. ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate (max 1.2 pt)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (max 1 pt)	Determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione (max 1 pt)	Eventuali indicatori per i settori nei quali ne è consolidato l'uso a livello internazionale di cui al comma 4 dell'art. 3 del DM (max 0.5 pt)	TOTALE
Organic Diradicals Bridged by Inverted Singlet-Triplet Units for Optical-Spin Interfaces	0.30	1.20	1.00	0.65	0.20	3.35
Turning on Organic Radical Emitters	0.30	1.20	1.00	0.65	0.20	3.35
Singlet-Triplet Inversion in Triangular Boron Carbon Nitrides	0.30	1.20	1.00	0.90	0.35	3.75
Shedding light on thermally-activated delayed fluorescence	0.30	1.20	1.00	0.57	0.50	3.57

Shining Light on Inverted Singlet-Triplet Emitters	0.30	1.20	1.00	0.65	0.50	3.65
Solid state solvation: a fresh view	0.30	1.20	1.00	0.30	0.50	3.30
A Comprehensive Approach to Exciton Delocalization and Energy Transfer	0.30	1.20	1.00	0.65	0.35	3.50
Multi-layer Gaussian-based multi-configuration time-dependent Hartree (ML-GMCTDH) simulations of ultrafast charge separation in a donor-acceptor complex	0.30	1.20	1.00	0.73	0.35	3.58
Quantum dynamical simulations of intra-chain exciton diffusion in an oligo (para-phenylene vinylene) chain at finite temperature	0.30	1.20	1.00	0.65	0.50	3.65
Antiadiabatic View of Fast Environmental Effects on Optical Spectra	0.30	1.20	1.00	0.30	0.35	3.15
Dynamical disorder and resonance energy transfer: A novel quantum-classical approach	0.30	1.20	1.00	0.90	0.20	3.60
Intermolecular Energy Transfer in Real Time	0.30	1.20	1.00	0.90	0.35	3.75
Consistenza complessiva della produzione scientifica, intensità e continuità temporale						11.36
PUNTEGGIO COMPLESSIVO						53.56

PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO

TITOLI E CURRICULUM	37.50
PRODUZIONE SCIENTIFICA	53.56
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	91.06

ALLEGATO N. 3

Candidato: 2455689

Attribuzione punteggi ai titoli ed al curriculum, da parte dei Commissari all'unanimità, e valutazione conoscenza della lingua inglese

TITOLI E CURRICULUM	PUNTEGGI ATTRIBUITI
Dottorato di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'estero	10.00
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero	3.10
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	4.00
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi	0.90
Titolarietà di brevetti	0.00
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	5.40
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	0.20
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	23.60
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica (max 0.3 pt)	Congruenza di ciascuna pubblicazione con il G.S.D. per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più S.S.D. ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate (max 1.2 pt)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (max 1 pt)	Determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione (max 1 pt)	Eventuali indicatori per i settori nei quali ne è consolidato l'uso a livello internazionale di cui al comma 4 dell'art. 3 del DM (max 0.5 pt)	TOTALE
Computational efficiency meets spectroscopic accuracy: an unsupervised workflow for equilibrium geometries and vibrational effects in gas-phase prebiotic molecules	0.30	1.20	0.80	0.54	0.50	3.34
Vibrational second-order perturbation theory based on curvilinear	0.30	1.20	1.00	0.90	0.20	3.60

coordinates: Thermochemical applications						
Anharmonicity in Molecular Crystals: Generalized Perturbation Theory Meets Periodic Computations	0.30	1.20	1.00	0.65	0.20	3.35
Structural and Electronic Evolution of Ethanolamine upon Microhydration: Insights from Hyperfine Resolved Rotational Spectroscopy	0.30	1.20	1.00	0.30	0.50	3.30
Unbiased Comparison between Theoretical and Experimental Molecular Structures and Properties: Toward an Accurate Reduced-Cost Evaluation of Vibrational Contributions	0.30	1.20	1.00	0.90	0.50	3.90
Accurate Vibrational and Ro-Vibrational Contributions to the Properties of Large Molecules by a New Engine Employing Curvilinear Internal Coordinates and Vibrational Perturbation Theory to Second Order	0.30	1.20	1.00	0.90	0.50	3.90
Harnessing the power of curvilinear internal coordinates: from molecular structure prediction to vibrational spectroscopy	0.30	1.20	0.50	1.00	0.35	3.35
Accurate Structures and Spectroscopic Parameters of Guanine Tautomers in the Gas Phase by the Pisa Conventional and Explicitly Correlated Composite Schemes (PCS and PCS-F12)	0.30	1.20	0.80	0.30	0.50	3.10
Perturb-Then- Diagonalize Vibrational Engine Exploiting Curvilinear Internal Coordinates	0.30	1.20	1.00	0.73	0.50	3.73

General Perturb-Then-Diagonalize Model for the Vibrational Frequencies and Intensities of Molecules Belonging to Abelian and Non-Abelian Symmetry Groups	0.30	1.20	1.00	0.73	0.50	3.73
Theory meets experiment for unravelling the C1s X-ray photoelectron spectra of pyridine, 2-fluoropyridine, and 2,6-difluoropyridine	0.30	1.20	1.00	0.54	0.20	3.24
Development and Implementation of Advanced Fitting Methods for the Calculation of Accurate Molecular Structures	0.30	1.20	1.00	0.60	0.50	3.60
Consistenza complessiva della produzione scientifica, intensità e continuità temporale						10.93
PUNTEGGIO COMPLESSIVO						53.07

PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO

TITOLI E CURRICULUM	23.60
PRODUZIONE SCIENTIFICA	53.07
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	76.67

ALLEGATO N. 4

Candidato: 2448352

Attribuzione punteggi ai titoli ed al curriculum, da parte dei Commissari all'unanimità, e valutazione conoscenza della lingua inglese

TITOLI E CURRICULUM	PUNTEGGI ATTRIBUITI
Dottorato di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'estero	10.00
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero	4.65
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	8.00
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi	2.20
Titolarità di brevetti	0.00
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	7.00
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	0.20
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	32.05
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica (max 0.3 pt)	Congruenza di ciascuna pubblicazione con il G.S.D. per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più S.S.D. ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate (max 1.2 pt)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (max 1 pt)	Determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione (max 1 pt)	Eventuali indicatori per i settori nei quali ne è consolidato l'uso a livello internazionale di cui al comma 4 dell'art. 3 del DM (max 0.5 pt)	TOTALE
Implementation of quasiclassical mapping approaches for nonadiabatic molecular dynamics in the PySurf package	0.30	1.20	0.80	0.60	0.20	3.10
Dynamics of high-dimensional quantum systems coupled to a harmonic bath. General theory and implementation via multiconfigurational wave packets and	0.30	1.20	1.00	1.00	0.35	3.85

truncated hierarchical equations for the mean-fields						
Advanced quantum and semiclassical methods for simulating photoinduced molecular dynamics and spectroscopy	0.15	1.20	1.00	0.47	0.35	3.17
Following excited-state chemical shifts in molecular ultrafast x-ray photoelectron spectroscopy	0.30	1.20	1.00	0.30	0.50	3.30
Quantum dynamics of the photoinduced charge separation in a symmetric donor-acceptor-donor triad: The role of vibronic couplings, symmetry and temperature	0.30	1.20	1.00	1.00	0.35	3.85
Nonadiabatic quantum dynamics of the coherent excited state intramolecular proton transfer of 10-hydroxybenzo[h]quinoline	0.30	1.20	0.80	1.00	0.35	3.65
Ultrafast dynamics of 2-thiouracil investigated by time-resolved Auger spectroscopy	0.30	1.20	0.80	0.30	0.20	2.80
Open system dynamics using Gaussian-based multiconfigurational time-dependent Hartree wavefunctions: Application to environment-modulated tunneling	0.30	1.20	1.00	0.90	0.20	3.60
Quantum dynamics and spectroscopy of dihalogens in solid matrices. I. Efficient simulation of the photodynamics of the embedded I2Kr18 cluster using the G-MCTDH method	0.30	1.20	1.00	0.73	0.20	3.43
Quantum dynamics and spectroscopy of dihalogens in solid matrices. II. Theoretical aspects	0.30	1.20	1.00	0.73	0.20	3.43

and G-MCTDH simulations of time-resolved coherent Raman spectra of Schrödinger cat states of the embedded I2Kr18 cluster						
Time-resolved spectra of I2 in a krypton crystal by G-MCTDH simulations: Nonadiabatic dynamics, dissipation and environment driven decoherence	0.30	1.20	1.00	0.90	0.20	3.60
Photodissociation dynamics in the first absorption band of pyrrole. II. Photofragment distributions for the $1 A_2 (\pi \sigma^*) \leftarrow X-1 A_1 (\pi \pi)$ transition	0.30	1.20	1.00	0.90	0.20	3.60
Consistenza complessiva della produzione scientifica, intensità e continuità temporale						11.91
PUNTEGGIO COMPLESSIVO						53.29

PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO

TITOLI E CURRICULUM	32.05
PRODUZIONE SCIENTIFICA	53.29
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	85.34

ALLEGATO N. 5

Candidato: 2452754

Attribuzione punteggi ai titoli ed al curriculum, da parte dei Commissari all'unanimità, e valutazione conoscenza della lingua inglese

TITOLI E CURRICULUM	PUNTEGGI ATTRIBUITI
Dottorato di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'estero	10.00
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero	0.65
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	8.00
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi	1.40
Titolarità di brevetti	0.00
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	3.00
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	0.00
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	23.05
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica (max 0.3 pt)	Congruenza di ciascuna pubblicazione con il G.S.D. per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più S.S.D. ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate (max 1.2 pt)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (max 1 pt)	Determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione (max 1 pt)	Eventuali indicatori per i settori nei quali ne è consolidato l'uso a livello internazionale di cui al comma 4 dell'art. 3 del DM (max 0.5 pt)	TOTALE
Spin-Polarized Nonferromagnetic Surfaces for Electrocatalysis: Chemo-Spintronics	0.30	1.20	1.00	0.30	0.20	3.00
Effects of surface chemical modifications on the adhesion of metallic interfaces. An high- throughput first- principle analysis	0.30	1.20	1.00	0.60	0.50	3.60

Dynamical Screening of Local Spin Moments at Metal-Molecule Interfaces	0.30	1.20	1.00	0.30	0.20	3.00
A Hybrid Magneto-Optic Capacitive Memory with Picosecond Writing Time	0.30	1.20	1.00	0.30	0.20	3.00
Short hydrogen bonds enhance nonaromatic protein-related fluorescence	0.30	1.20	1.00	0.30	0.50	3.30
Charge transfer as a ubiquitous mechanism in determining the negative charge at hydrophobic interfaces	0.30	1.20	1.00	0.73	0.50	3.73
Termination effects in aluminosilicate and aluminogermanate imogolite nanotubes: A density functional theory study	0.30	1.20	0.80	0.65	0.20	3.15
π -anisotropy: A nanocarbon route to hard magnetism	0.30	1.20	1.00	0.30	0.35	3.15
Understanding the electrochemical double layer at the hematite/water interface: A first principles molecular dynamics study	0.30	1.20	1.00	0.30	0.35	3.15
The role of cation-vacancies for the electronic and optical properties of aluminosilicate imogolite nanotubes: A non-local, linear-response TDDFT study	0.30	1.20	1.00	0.60	0.35	3.45
The potential of imogolite nanotubes as (co-)photocatalysts: A linear-scaling density functional theory study	0.30	1.20	1.00	0.50	0.35	3.35
Wavepacket splitting and two-pathway deactivation in the photoexcited visual pigment isorhodopsin	0.30	1.20	1.00	0.30	0.35	3.15

Consistenza complessiva della produzione scientifica, intensità e continuità temporale	8.26
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	47.29

PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO

TITOLI E CURRICULUM	23.05
PRODUZIONE SCIENTIFICA	47.29
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	70.34

ALLEGATO N. 6

Candidato: 2454438

Attribuzione punteggi ai titoli ed al curriculum, da parte dei Commissari all'unanimità, e valutazione conoscenza della lingua inglese

TITOLI E CURRICULUM	PUNTEGGI ATTRIBUITI
Dottorato di ricerca o equipollenti, ovvero, per i settori interessati, il diploma di specializzazione medica o equivalente, conseguito in Italia o all'estero	10.00
Eventuale attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero	0.40
Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	5.00
Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi	0.00
Titolarità di brevetti	0.00
Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali	2.20
Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	0.00
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	17.60
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE	Originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza di ciascuna pubblicazione scientifica (max 0.3 pt)	Congruenza di ciascuna pubblicazione con il G.S.D. per il quale è bandita la procedura e con l'eventuale profilo, definito esclusivamente tramite indicazione di uno o più S.S.D. ovvero con tematiche interdisciplinari ad essi correlate (max 1.2 pt)	Rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (max 1 pt)	Determinazione analitica, anche sulla base di criteri riconosciuti nella comunità scientifica internazionale di riferimento, dell'apporto individuale del candidato nel caso di partecipazione del medesimo a lavori in collaborazione (max 1 pt)	Eventuali indicatori per i settori nei quali ne è consolidato l'uso a livello internazionale di cui al comma 4 dell'art. 3 del DM (max 0.5 pt)	TOTALE
Solid-liquid interfaces in MARTINI 3: Modeling approaches and the case study of silica surfaces in water	0.30	1.20	1.00	0.33	0.20	3.03
The Role of Counterion Size in Defining Star-Shaped Polyelectrolytes Thermodynamics, Conformations, and Ion Dynamics	0.30	1.20	1.00	0.90	0.20	3.60

Effect of Ring Composition on the Statics and Dynamics of Block Copolyelectrolyte Catenanes	0.30	1.20	1.00	0.30	0.20	3.00
Effect of Counterion Size on Knotted Polyelectrolyte Conformations	0.30	1.20	1.00	0.73	0.35	3.58
Tuning Knotted Copolyelectrolyte Conformations via Solution Properties	0.30	1.20	1.00	0.73	0.20	3.43
How chemical structure and composition impact on the release of salt-like drugs from hydrophobic matrices: Variation of mechanism upon adding hydrophilic features to PMMA	0.30	1.20	1.00	0.30	0.20	3.00
Inducing pH control over the critical micelle concentration of zwitterionic surfactants via polyacids adsorption: Effect of chain length and structure	0.30	1.00	1.00	0.30	0.50	3.10
Tunable Knot Segregation in Copolyelectrolyte Rings Carrying a Neutral Segment	0.30	1.20	1.00	0.73	0.20	3.43
Electrostatically Cross-Linked Reversible Gels-Effects of pH and Ionic Strength	0.30	1.20	1.00	0.30	0.50	3.30
Impact of Charge Correlation, Chain Rigidity, and Chemical Specific Interactions on the Behavior of Weak Polyelectrolytes in Solution	0.30	1.20	1.00	0.73	0.35	3.58
Hydrogen Transfer Activation via Stabilization of Coordinatively Vacant Sites: Tuning Long-Range π -System Electronic Interaction between Ru(0) and NHC Pendants	0.30	1.20	1.00	0.30	0.35	3.15

Out of Equilibrium Self-Assembly of Janus Nanoparticles: Steering It from Disordered Amorphous to 2D Patterned Aggregates	0.30	1.20	1.00	0.73	0.20	3.43
Consistenza complessiva della produzione scientifica, intensità e continuità temporale						10.43
PUNTEGGIO COMPLESSIVO						50.06

PUNTEGGIO FINALE COMPLESSIVO

TITOLI E CURRICULUM	17.60
PRODUZIONE SCIENTIFICA	50.06
CONOSCENZA LINGUA INGLESE	Ottima
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	67.66