

PROCEDURA PUBBLICA DI SELEZIONE PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO AI SENSI DELL'ART.24, COMMA 3, LETT. A) DELLA LEGGE 240/2010 PRESSO LA SCUOLA NORMALE SUPERIORE - SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE CHIM/02 CHIMICA FISICA, BANDITA CON D.D. N.232 DEL 31.03.2022.

RELAZIONE RIASSUNTIVA

La Commissione giudicatrice della procedura pubblica di selezione sopra citata, nominata con D.D. n.479 del 28.06.2022, composta da:

- prof. Fausto Elisei, ordinario del settore concorsuale oggetto della selezione, in servizio presso l'Università degli Studi di Perugia;
- prof.ssa Maria Lucia Curri, ordinario del settore concorsuale oggetto della selezione, in servizio presso l'Università degli studi di Bari Aldo Moro;
- prof. Mauro Stener, ordinario del settore concorsuale oggetto della selezione in servizio presso l'Università di Trieste.

ha tenuto complessivamente n. 4 riunioni telematiche iniziando i lavori il 26/07/2022 e concludendoli il 13/10/2022, come di seguito indicato:

- I riunione: giorno 26/07/2022 dalle ore 9.30 alle ore 12.00
II riunione: giorno 10/10/2022 dalle ore 17.30 alle ore 19.30
III riunione: giorno 12/10/2022 dalle ore 9.00 alle ore 10.30
IV riunione: giorno 13/10/2022 dalle ore 17.00 alle ore 20.30

Nella **prima riunione** la Commissione:

- ha preliminarmente preso visione degli atti normativi e regolamentari che disciplinano lo svolgimento della procedura;
- ha proceduto alla designazione, nel proprio seno, di Presidente e Segretario attribuendo tali funzioni rispettivamente al Prof. Fausto Elisei e al Prof. Mauro Stener;
- ha preso atto della durata massima dei lavori (nel limite di quattro mesi dal giorno 28.06.2022 data del decreto di nomina della Commissione);
- ha preso atto che il numero dei candidati ammessi alla selezione in possesso dei requisiti è inferiore a sei e ha proceduto a predeterminare i criteri e parametri da utilizzare per l'attribuzione di un punteggio ai titoli e alle singole pubblicazioni dei candidati successiva alla discussione pubblica;
- ha stabilito le modalità di accertamento dell'adeguata conoscenza della lingua inglese prevista dal bando contestualmente allo svolgimento della discussione pubblica, nonché i criteri e le modalità di espressione del relativo giudizio.

Il verbale n.1 contenente i criteri e parametri di valutazione adottati dalla Commissione nella seduta preliminare è stato trasmesso al responsabile del procedimento al fine di renderli noti ai candidati – come previsto dal Regolamento, tramite pubblicazione effettuata nell'apposita sezione del sito Web della Scuola dedicato alla selezione, a cura degli uffici amministrativi. Decorsi sette giorni dalla data di pubblicazione dei criteri e parametri predetti, la Commissione ha potuto proseguire i lavori prendendo visione delle domande ammesse.

Nella **seconda riunione** la Commissione:

- ha preso visione dell'elenco dei candidati che hanno presentato domanda, non esclusi o non rinunciatari alla data della riunione medesima, che sono i seguenti:

Alessandrini Silvia

Arvanitidis Athanasios

Mendolicchio Marco

Rani Namrata

e ognuno dei componenti della Commissione ha reso apposita dichiarazione ai sensi del D.P.R. n. 445/2000, allegata al verbale della seconda riunione, di non avere relazioni di parentela e affinità



entro il IV grado incluso, con gli altri commissari e con i candidati (art.5, comma 2 del D. Lgs 1172/1948), che non sussistono le cause di astensione di cui agli artt. 51 e 52 del c.p.c. e ha verificato l'insussistenza delle altre cause di incompatibilità e l'assenza di conflitto di interessi in relazione a quanto previsto dall'art. 7 comma 4-bis del Regolamento, esplicitando gli eventuali rapporti intercorsi o in essere tra componenti e candidati, prima di procedere con le attività di valutazione

- ricevuta dagli uffici la documentazione dei candidati ha proceduto preliminarmente, alla verifica, con riferimento a ciascun candidato, del possesso del titolo di studio richiesto come requisito di partecipazione alla selezione al fine di accertarne l'eventuale non ammissibilità alla luce di quanto previsto dall'art.2, comma 1, del bando e ha accertato e dichiarato tutti i candidati essere in possesso dei titoli di studio previsti come requisito di ammissione.

- ha pertanto preso visione analitica dei titoli e delle pubblicazioni presentati dai seguenti candidati in possesso dei titoli di studio previsti quali requisiti di partecipazione alla selezione:

Alessandrini Silvia

Arvanitidis Athanasios

Mendolicchio Marco

Rani Namrata

- ha proceduto ad esaminare analiticamente, per ognuno dei predetti candidati, i titoli e le pubblicazioni presentati, specificando se valutabili o meno e i motivi della eventuale non valutabilità dei medesimi (allegato 1 alla relazione riassuntiva che è la copia del corrispondente "elenco dei titoli e delle pubblicazioni valutabili" di ciascuno dei candidati ammessi alla discussione allegata al verbale n.2).

Nella **terza riunione** si è svolta la discussione pubblica in cui i candidati hanno discusso e illustrato davanti alla Commissione stessa, mediante collegamento telematico da remoto, attraverso la piattaforma Microsoft Teams, i titoli e la produzione scientifica e hanno dimostrato contestualmente – con le modalità specificate nella riunione preliminare - l'adeguata conoscenza o meno della lingua straniera.

Alla discussione pubblica, tra i candidati convocati per sostenerla sono risultati presenti i seguenti candidati:

Alessandrini Silvia

Arvanitidis Athanasios

Mendolicchio Marco

Rani Namrata

Nella **quarta riunione** la Commissione ha proceduto ad effettuare la valutazione collegiale dei titoli e delle singole pubblicazioni dei candidati che hanno sostenuto la discussione, con assegnazione di punteggio, ed ha espresso il giudizio sull'accertamento della conoscenza della lingua straniera, attenendosi ai criteri di massima stabiliti nella prima riunione. I giudizi collegiali relativi alle predette valutazioni con assegnazione di punteggio sono allegati alla presente relazione riassuntiva di cui costituiscono parte integrante (allegato 2 alla relazione riassuntiva).

Sulla base dei punteggi assegnati ai candidati, la Commissione ha quindi proceduto a redigere la seguente graduatoria finale di merito formata secondo l'ordine decrescente dei punteggi conseguiti dai soli candidati che abbiano ottenuto una valutazione positiva ai fini della presente selezione (conseguendo una valutazione di titoli e pubblicazioni pari ad almeno 70 punti su 100 e superando con esito positivo l'accertamento dell'adeguata conoscenza della lingua straniera):

1) *Mendolicchio Marco* *punti 70.2 su 100*

Infine la Commissione sulla base della predetta graduatoria ha individuato, con deliberazione assunta all'unanimità, nel Dott. **Mendolicchio Marco** il candidato comparativamente più



meritevole nella procedura di selezione per il reclutamento di n.1 ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24 della legge 240/2010 presso la Scuola Normale Superiore con riferimento al s.s.d CHIM/02, per l'attività di ricerca "Studio teorico-computazionale di parametri spettroscopici e cinetici per processi prebiotici in ambienti extra-terrestri" proponendone il nominativo per la chiamata, con la seguente motivazione comparativa e riassuntiva finale:

Il candidato Mendolicchio Marco dimostra una chiara autonomia scientifica di ottimo livello nel suo campo di ricerca, nonché intense attività in collaborazione con più gruppi di ricerca in ambito nazionale e internazionale.

Dopo la redazione collegiale da parte della Commissione della presente relazione riassuntiva, alle ore 20.30 del giorno 13/10/2022 il Presidente ha dichiarato chiusi i lavori, impegnandosi a consegnare gli atti concorsuali al Responsabile del procedimento, con lettera di trasmissione indirizzata al Direttore della Scuola.

Letto, approvato e sottoscritto:

PER LA COMMISSIONE:

Prof. Mauro Stener



ELENCO DEI TITOLI E DELLE PUBBLICAZIONI VALUTABILI

1) CANDIDATO: Alessandrini Silvia

TITOLI E CURRICULUM:

TITOLI VALUTABILI

- 1 – Dottorato di Ricerca in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari “Modelling Weak Interactions in the Gas Phase: From Rotational Spectroscopy to Reaction Rates Using Accurate Quantum-Chemical Approaches”.
- 2 – Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale in inglese “Photochemistry and Molecular Materials” per l'anno 2019/2020 (2h) CHIM/02 (attività didattica).
- 3 – Assistente al Laboratorio del corso di "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in “Chimica” per l'anno 2019/2020 (6h) CHIM/02 (attività didattica).
- 4 – Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale in inglese “Photochemistry and Molecular Materials” per l'anno 2020/2021 (4h) CHIM/02 (attività didattica).
- 5 – Attività di Tutor per il modulo 2 del corso “Metodi Spettroscopici” della Laurea Triennale in Chimica e Chimica dei Materiali per l’anno 2020/2021 (32h) CHIM/02 (attività didattica).
- 6 – Assistente al Laboratorio del corso di "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in “Chimica” per l'anno 2020/2021 (12h) CHIM/02 (attività didattica).
- 7 – Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale inglese "Photochemistry and Molecular Materials” per l'anno 2021/2022 (2h) CHIM/02 (attività didattica).
- 8 – Lezione di 2h riguardo i sistemi non-covalenti per il primo anno del corso di dottorato in “Molecular Sciences for Earth and Space” (MOSES) della Scuola Superiore Meridionale (attività didattica).
- 9 – Attività di Tutor per il modulo 2 del corso “Metodi Spettroscopici” della Laurea Triennale in Chimica e Chimica dei Materiali per l’anno 2021/2022 (32h) CHIM/02 (attività didattica).
- 10 – Attività di Tutor per il corso “Termodinamica e Modellistica Molecolare” della Laurea Magistrale in Chimica per l’anno 2021/2022 (16h) CHIM/02 (attività didattica).
- 11 – University of Mainz, Germania (attività di ricerca).
- 12 – University of Oxford, Regno Unito (attività di ricerca).
- 13 – Sincrotrone SOLEIL, Parigi 2021 (attività di ricerca).
- 14 – Sincrotrone SOLEIL, Parigi 2022 (attività di ricerca).
- 15 – Rotational and Computational Spectroscopy dell’Università di Bologna, P.I. Prof.ssa Cristina Puzzarini (attività di ricerca).
- 16 – SMART@SNS, P.I. Prof. Vincenzo Barone (attività di ricerca).
- 17 – Gruppo di chimica Teorica del prof. Jurgen Gauss (attività di ricerca).
- 18 – Gruppo di chimica Teorica del prof. David P. Tew (attività di ricerca).
- 19 – Winter Modeling 2019- Special Edition on Valentine’s Day (presentazione orale a invito).
- 20 – 4th COST-MOLIM General Meeting (presentazione orale).
- 21 – Young Reaserchers Meet Molecular Spectroscopy (presentazione orale).



- 22 – VI Congresso della Divisione di Chimica Teoria e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana (SCI) (presentazione orale).
- 23 – Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation (VS-CTC) (presentazione orale a invito).
- 24 – International Symposium on Molecular Spectroscopy, Topic: Structure Determination (presentazione orale).
- 25 – Merck Young Chemists' Symposium (MYCS) (presentazione orale).
- 26 – Winter Modeling 2022 (presentazione orale).
- 27 – COSPAR 44th Scientific Assembly (presentazione orale).
- 28 – Miglior poster al Meeting Astrochem II - 2 Italian Workshop on Astrochemistry "Chemical Evolution in our Galaxy: Spectroscopy, Observations and Reactivity" (premio)
- 29 – Miglior pubblicazione nel campo dello sviluppo metodologico assegnato dalla Divisione di chimica teorica e computazionale (DCTC) della società chimica italiana (SCI) (premio)

TITOLI NON VALUTABILI

- 1 – Vincitrice di una Borsa Erasmus Traineeship di tre mesi presentato come premio, è **non valutabile** in quanto non è classificabile come tale.

Ulteriori TITOLI NON VALUTABILI in base alla tipologia e ai criteri di valutazioni indicati nel verbale 1 (titoli di cui al DM 243/2011)

- 1 – Research Topic “Chemical Evolution Across Space: The PAH Connection from Interstellar Molecules to Prebiotic Processes and Beyond” of Frontiers in Astronomy and Space Sciences. Editors Prof. V. Barone and Prof. M. d’Ischia (top coordinator).
- 2 – ERC AdG-Barone DREAMS: final meeting 2017 (presentazione poster).
- 3 – Gruppo di Chimica Teorica del prof. Jürgen Gauss, Università di Mainz, 14 dicembre 2018 (seminario di gruppo).
- 4 – ASTRO-Winter Modeling "Advances in computational and experimental modeling: Application to Astrochemistry”, Bologna 2018 (partecipazione).
- 5 – AstrochemII - 2 Italian Workshop on Astrochemistry "Chemical Evolution in our Galaxy: Spectroscopy, Observations and Reactivity”, Follonica 2018 (presentazione poster).
- 6 – School of Advanced Studies - Computational Spectroscopy: Bridging Theory and Experiment, Como 2018 (partecipazione).
- 7 – Modern Wavefunctions Methods in Electronic Structure Theory Summer School, Gelsenkirchen 2018 (partecipazione).
- 8 – Seminario nel gruppo Trove/ExoMol del professor Sergei Yurchenko, UCL London's Global University 2021 (partecipazione).
- 9 – Tesi Magistrale di Giorgia Giusti, presso l’Università di Bologna 2021 (tutor/correlatore).
- 10 – Tesi Magistrale di Mattia Ravasio, presso l’università Milano Bicocca con tirocinio svolto presso l’università di Bologna 2021 (tutor/correlatore).
- 11 – Les Houches School of Physics, Laboratory Astrophysics, 2023 (partecipazione, non ancora tenuta).
- 12 – Attuale supervisione della dottoranda Hexu Ye presso l’Università di Bologna (tutor di dottorato).
- 13 – Certificazione IELTS (lingua inglese) con un punteggio di 8.5 (C1) 2017.
- 10 – Gestore dell’account Twitter del gruppo Rot&Comp di Bologna dal 2019.

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI

- 1 – Accuracy of rotational parameters predicted by high-level quantum-chemical calculations: case study of sulfur-containing molecules of astrochemical interest.



- 2 – Unveiling the Sulfur–Sulfur Bridge: Accurate Structural and Energetic Characterization of a Homochalcogen Intermolecular Bond.
- 3 – The Unexplored World of Cycloalkene–Water Complexes: Primary and Assisting Interactions Unraveled by Experimental and Computational Spectroscopy.
- 4 – Extension of the “Cheap” Composite Approach to Noncovalent Interactions: The jun-ChS Scheme.
- 5 – Rotational Spectroscopy Meets Quantum Chemistry for Analyzing Substituent Effects on Non-Covalent Interactions: The Case of the Trifluoroacetophenone–Water Complex.
- 6 – In search of phosphorus in astronomical environments: The reaction between the CP radical ($X \Sigma^+_{2+}$) and methanimine.
- 7 – Computational molecular spectroscopy.
- 8 – Fate of the gas-phase reaction between oxirane and the CN radical in interstellar conditions.
- 9 – junChS and junChS-F12 models: efficient composite parameter-free yet accurate schemes for energies and structures of non-covalent complexes.
- 10 – Gas-phase identification of (Z)-1,2-ethenediol, a key prebiotic intermediate in the formose reaction.
- 11 – Stacked but not Stuck: Unveiling the Role of $\pi \rightarrow \pi^*$ Interactions with the Help of the Benzofuran– Formaldehyde Complex.
- 12 – Dipolar spin-spin coupling as auxiliary tool for structure determination of small isolated molecules.

TESI DI DOTTORATO: Modelling Weak Interactions in the Gas Phase: From Rotational Spectroscopy to Reaction Rates Using Accurate Quantum-Chemical Approaches, **NON VALUTABILE** in quanto non indicata e prodotta dal candidato ai fini della valutazione.

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

Il candidato presenta una produzione scientifica complessiva, risultante dal curriculum, pari a n. 19 pubblicazioni, svolta nell’arco di 6 anni effettivi.

2) CANDIDATO: *Arvanitidis Athanasios*

TITOLI E CURRICULUM:

TITOLI VALUTABILI

- 1 – Dottorato di Ricerca in Chimica “Visions of aromaticity From boron clusters to conjugated polycyclic hydrocarbons”.
- 2 – E04Q8sA, Introduction Labs for Biomedical students and Dentists (Wet Lab) (attività didattica)
- 3 – CH3204 Symmetry, Spectroscopy and Quantum Mechanics (Computer Lab, Master Level) (attività didattica).
- 4 – C9540 - Introduction to Computational Quantum Chemistry (Computer Lab, Master Level) (attività didattica).
- 5 – EUCCO-CC9 (presentazione orale).

TITOLI NON VALUTABILI

- 1 – FWO Grant for a long stay abroad presentato come premio, è **non valutabile** in quanto non è classificabile come tale.
- 2 – National Scholarship Programme of the Slovak Republic, Call October 2021, presentato come premio, è **non valutabile** in quanto non è classificabile come tale.



Ulteriori TITOLI NON VALUTABILI in base alla tipologia e ai criteri di valutazioni indicati nel verbale 1 (titoli di cui al DM 243/2011)

- 1 – MQM Conference 2019, Heidelberg, Germany (presentazione poster).
- 2 – 6th Molcas Developers' Workshop, Leuven, Belgium (partecipazione).
- 3 – CB2017, Aachen Germany (presentazione poster)
- 4 – WATOC, Heidelberg, Germany (presentazione poster).
- 5 – EJD-TCCM, Leuven, Belgium (presentazione poster).
- 6 – QCB12, Leuven, Belgium (partecipazione).
- 7 – 10th Intensive Course, Leuven, Belgium (partecipazione).
- 8 – MAGIC 2014, Tvärminne Zoological Station, Finland (partecipazione).
- 9 – XI Girona Seminar, Girona, Spain (partecipazione).
- 10 – EUCCO-CC9, Sopron, Hungary (partecipazione).

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI

- 1 – Valence bonds in planar and quasi-planar boron disks.
- 2 – Valence bonds in elongated boron clusters.
- 3 – The quantization of the $E \otimes e$ Jahn-Teller Hamiltonian.
- 4 – The quantization of the Rabi Hamiltonian.
- 5 – Directed graphs and induced magnetic multipoles in polycyclic hydrocarbons.
- 6 – Quantum rules for planar boron nanoclusters.
- 7 – Synthesis of $\pm$ -crispine A via a nitrosoalkene hetero-Diels-Alder addition to ethyl vinyl ether.

TESI DI DOTTORATO: Visions of aromaticity From boron clusters to conjugated polycyclic hydrocarbons, **NON VALUTABILE** in quanto non indicata e prodotta dal candidato ai fini della valutazione.

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

Il candidato presenta una produzione scientifica complessiva, risultante dal curriculum, pari a n. 7 pubblicazioni, svolta nell'arco di 11 anni effettivi.

3) CANDIDATO: Mendolicchio Marco

TITOLI E CURRICULUM:

TITOLI VALUTABILI

- 1 – Dottorato di Ricerca in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari “Development and implementation of theoretical models for the prediction of molecular structures and vibrational spectra”.
- 2 – Corso: Seminari sulle frontiere della chimica Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2022 (attività didattica).
- 3 – Corso: Seminari alle frontiere dell'astrochimica Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 2 Scuola Superiore Meridionale (Napoli) 2022 (attività didattica).
- 4 – Corso: Astrochemistry and Molecular Astrophysics Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 20 Scuola Normale Superiore (Italia) 2021/22 (attività didattica).
- 5 – Corso: Scientific Programming Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 20 Scuola Normale Superiore (Italia) 2020/21 (attività didattica).
- 6 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 13 Scuola Normale Superiore (Italia) 2020/21 (attività didattica).



- 7 – Corso: Scientific Programming Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 12 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019/20 (attività didattica).
- 8 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 12 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019/20 (attività didattica).
- 9 – Corso: Scientific Programming Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 16 Scuola Normale Superiore (Italia) 2018/19 (attività didattica).
- 10 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 13 Scuola Normale Superiore (Italia) 2018/19 (attività didattica).
- 11 – Corso: 106° Corso di Orientamento Universitario della Scuola Normale Superiore di Pisa, svolto a San Miniato (Italia) Ruolo: Tutor Ore di didattica frontale: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019 (attività didattica).
- 12 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 9 Scuola Normale Superiore (Italia) 2017/18 (attività didattica).
- 13 – Corso: 103° Corso di Orientamento Universitario della Scuola Normale Superiore di Pisa, svolto a Follonica (Italia) Ruolo: Tutor Ore di didattica frontale: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019 (attività didattica).
- 14 – Corso: Theoretical Models for the Simulation of Vibrational Spectra Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 8 Università di Pisa (Italia) 2017/18 (attività didattica).
- 15 – Corso: 101° Corso di Orientamento Universitario della Scuola Normale Superiore di Pisa, svolto a San Miniato (Italia) Ruolo: Tutor Ore di didattica frontale: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2017 (attività didattica).
- 16 – Haraldvollen Senter (Norvegia) 2019 (attività di ricerca).
- 17 – Wissenschaftspark Gelsenkirchen (Germania) 2018 (attività di ricerca).
- 18 – Centro DreamsLab (Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia) 2012-2016 (attività di ricerca).
- 19 – Laboratorio SMART (Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia) dal 2016 (attività di ricerca).
- 20 – ERC ADVANCED GRANT DREAMS (Development of a Research Environment for Advanced Modelling of Soft matter) 2013-2018 (attività di ricerca).
- 21 – PRIN 2015 “STARS in the CAOS, Simulation Tools for Astrochemical Reactivity and Spectroscopy in the Cyberinfrastructure for Astrochemical Organic Species” 2017-2020 (attività di ricerca).
- 22 – ASI17_BARONE: Vita nello Spazio: origine, presenza, persistenza della vita nello spazio, dalle molecole agli estremofili 2019-2022 (attività di ricerca).
- 23 – MIUR_PRIN17_BARONE - Physico-chemical Heuristic Approaches: Nanoscale Theory Of Molecular Spectroscopy (PHANTOMS) 2019-2022 (attività di ricerca).
- 24 – Astrochemistry – Materials under extreme conditions: clues from the gas phase (INSTM-UniBO-SNS joint PROJECT@SKIES- VILLAGE), progetto congiunto INSTM- UNIBO-SNS dal 2021 (attività di ricerca).
- 25 – Workshop DCTC 2022 (presentazione orale).
- 26 – Winter Modeling 2022 (presentazione orale).
- 27 – Merck Young Chemists' Symposium 2021 (presentazione orale).
- 28 – XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2021 (presentazione orale).
- 29 – Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation (VS-CTC) 2020 (presentazione orale).
- 30 – VI Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana 2019 (presentazione orale).
- 31 – 12th European Conference on Computational and Theoretical Chemistry 2019 (presentazione orale).
- 32 – Young Researchers Meet Spectroscopy – YRMS@2019 (presentazione orale).
- 33 – Winter Modeling 2019 (presentazione orale).
- 34 – VI Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana 2018 (presentazione orale).
- 35 – European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS) 2018 (presentazione orale).

- 36– Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM) 2018 (presentazione orale).
37 – Astrochem2@2018 – II Italian Workshop on Astrochemistry “Chemical Evolution in our Galaxy: Spectroscopy, Observations and Reactivity” 2018 (presentazione orale).
38 – ASTRO-Winter Modeling Advances in computational & experimental modeling: Application to Astrochemistry 2018 (presentazione orale).
39 – XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2017 (presentazione orale).
40 – Premio Pier Luigi Nordio 2017 (premio).

Ulteriori TITOLI NON VALUTABILI in base alla tipologia e ai criteri di valutazioni indicati nel verbale 1 (titoli di cui al DM 243/2011)

- 1 – Membro del comitato scientifico e organizzatore della conferenza internazionale “Merck Young Chemists’ Symposium” (MYCS 2022), di cui sono iniziati i lavori organizzativi e che si terrà a Rimini (Italia) dal 21 al 23 novembre 2022.
2 – Membro del comitato scientifico della conferenza internazionale “Autumn Meeting for Young Chemists in Biomedical Sciences” (AMYC BIOMED 2022), di cui sono iniziati i lavori organizzativi e che si terrà a Napoli (Italia) dal 17 al 19 ottobre 2022.
3 – Membro della commissione per la valutazione della prima fase del Premio Levi 2021, assegnato a due ricercatori under 35 appartenenti alla Società Chimica Italiana, autori di ricerche condotte in Italia, originali e di ampio interesse per le Scienze Chimiche, pubblicate su riviste scientifiche internazionali in versione finale nel periodo 01 gennaio – 31 dicembre 2021.
4 – Membro del comitato organizzativo e scientifico del Workshop nazionale Y-Rich (Young Research Ideas in Chemistry) 2022.
5 – All’interno del consiglio direttivo del Gruppo Giovani della Società Chimica Italiana, il ruolo è di rappresentante della divisione di Chimica Teorica e Computazionale e di tesoriere - dal 2022.
6 – Membro della commissione per l’assegnazione dei fondi per la mobilità per la classe di scienze della Scuola Normale Superiore di Pisa, in qualità di rappresentante degli studenti PhD della classe di scienze, dall’anno accademico 2017/2018 all’anno accademico 2019/2020 (partecipazione).
7 – Accesso su selezione alla fase finale del contest “ChiMiCapisce”, organizzato dal Gruppo Giovani della Società Chimica Italiana per capacità divulgative delle scienze chimiche 2018 (partecipazione).
8 – Workshop nazionale Y-Rich 2018 (partecipazione).
9 – “ERC AdG – Barone – DREAMS: final meeting, Advances in computational modelling: from isolated molecules to soft matter” Pisa (Italia) 2017 (presentazione poster).
10 – “Dalla modellizzazione computazionale alla realtà virtuale attraverso spettroscopia astrochimica” Napoli (Italia) 2017 (partecipazione).
11 – “Workshop DREAMS@Anacapri” tenutasi a Capri (Italia) 2017 (presentazione poster).
12 – Membro del Senato Accademico della Scuola Normale Superiore di Pisa, in qualità di rappresentante degli studenti ordinari della classe di scienze durante l’anno accademico 2015/2016.
13 – III congresso nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana 2015 (presentazione poster).
14 – “Winter Modeling 2015 – Complex Molecular Systems: Accuracy and Interpretation” tenutasi alla Scuola Normale Superiore di Pisa (Italia) 2015 (partecipazione).
15 – Membro del Consiglio di Classe della Scuola Normale Superiore di Pisa, in qualità di rappresentante degli studenti ordinari della classe di scienze durante l’anno accademico 2014/2015.

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI



- 1 – General Perturb-Then- Diagonalize Model for the Vibrational Frequencies and Intensities of Molecules Belonging to Abelian and Non-Abelian Symmetry Groups.
- 2 – Accuracy and Reliability in the Simulation of Vibrational Spectra: A Comprehensive Benchmark of Energies and Intensities Issuing From Generalized Vibrational Perturbation Theory to Second Order (GVPT2).
- 3 – The challenging equilibrium structure of HSSH: Another success of the rotational spectroscopy/quantum chemistry synergism.
- 4 – Systematic Study on the Absorption Features of Interstellar Ices in the Presence of Impurities.
- 5 – Theory meets experiment for unravelling the C1s X- ray photoelectron spectra of pyridine, 2-fluoropyridine, and 2, 6-difluoropyridine.
- 6 – Unveiling the sulfur– sulfur bridge: Accurate structural and energetic characterization of a homochalcogen intermolecular bond.
- 7 – Rotational and infrared spectroscopy of ethanimine: a route toward its astrophysical and planetary detection.
- 8 – Towards the SMART workflow system for computational spectroscopy.
- 9 – Development and implementation of advanced fitting methods for the calculation of accurate molecular structures.
- 10 – Exploring a chemical route for the formation of stable anions of polyynes $[C_nH^- (n = 2,4)]$ in molecular clouds.
- 11 –Structural features of the carbon-sulfur chemical bond: a semi- experimental perspective.
- 12 – Vibrationally resolved NEXAFS at C and N K-edges of pyridine, 2- fluoropyridine and 2, 6- difluoropyridine: A combined experimental and theoretical assessment.

TESI DI DOTTORATO: Development and implementation of theoretical models for the prediction of molecular structures and vibrational spectra, **NON VALUTABILE** in quanto non indicata e prodotta dal candidato ai fini della valutazione.

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

Il candidato presenta una produzione scientifica complessiva, risultante dal curriculum, pari a n. 12 pubblicazioni, svolta nell'arco di 7 anni effettivi.

4) **CANDIDATO:** *Rani Namrata*

TITOLI E CURRICULUM:

TITOLI VALUTABILI

- 1 – Dottorato di Ricerca in Chimica “Computational Quantum- Mechanical Approach to Study Stereoinversion in Astrophysically Relevant Chiral Amino Acids”.
- 2 – B.Sc. (Organic Chemistry/Inorganic Chemistry/ General Chemistry Practical) Teaching Hours: 19 hr per week (theory + practical) Purely on Ad hoc basis (attività didattica).
- 3 – B.Sc. (General Chemistry Practical) Teaching Hours: 6 hr per week Teaching Assistantship (Voluntarily) (attività didattica)
- 4 – B.Sc. (Physical Chemistry theory / General Chemistry Practical) Teaching Hours: 19 hr per week (theory + practical) Purely on Ad hoc basis (attività didattica).
- 5 – Department of Chemistry, Panjab University, Chandigarh - INDIA 2016-2018 (attività di ricerca).
- 6 – Department of Chemistry, Panjab University, Chandigarh - INDIA 2018-2021 (attività di ricerca).
- 7 – International Conference on Recent Advances in Applied Sciences (ICRAAS-2022) (presentazione orale).
- 8 – Indian Planetary Science Conference (IPSC-2022) (presentazione orale).



- th
9 – 75th International Symposium on Molecular Spectroscopy (ISMS) {virtual} (presentazione orale).
10 – ‘RCP’-National Symposium on ‘Chemistry and Interdisciplinary Sciences’ (presentazione orale).
11 – *RCP’-National Symposium* on ‘Current Advances in Chemical Sciences (presentazione orale).

Ulteriori TITOLI NON VALUTABILI in base alla tipologia e ai criteri di valutazioni indicati nel verbale 1 (titoli di cui al DM 243/2011)

- 1 – Virtual Winter School on Computational Chemistry Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (presentazione SFP).
- 2 – Technological Advancements in Science (National Webinar)GMN College Ambala Cantt-India (segreteria organizzativa).
- 3 – DAE National Computational Chemistry Symposium Bhabha Atomic Research Centre-Mumbai, India (presentazione poster)
- 4 – Theoretical Chemistry National Symposium (TCS-2019) Department of Chemistry, BITS Pilani, Rajasthan- India (presentazione poster).
- 5 – Workshop on Practical Aspects of Quantum Chemical Calculations - Kurukshetra University, Kurukshetra - India (partecipazione).
- 6 – Indo-German International Workshop on ‘Computing in Chemistry’ IIIT Hyderabad, India (presentazione poster).
- 7 – IManaging Isolation – Building a better Chemistry Culture Royal Society of Chemistry (RSC)-Webinar (partecipazione).
- 8 – Augmenting Writing Skills for Articulating Research: Popular Science Writing Department of Science and Technology (DST), & Vigyan Prasar (VP) - India (partecipazione).

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI

- 1 – Quantum-Mechanical rotational and vibrational signatures of astrophysically relevant gas-phase stereo-isomeric species of leucine.
- 2 – Gas-Phase stereoinversion in proteinogenic amino- acid isoleucine: Its astrophysical importance.
- 3 – Extra-terrestrial gas-phase stereoinversion in amino acid leucine: Thermal and photochemical channels.
- 4 – Mechanism and kinetics of astrophysically relevant gas-phase stereoinversion in glutamic acid: A computational study.
- 5 – Rotational and vibrational analysis of astrophysically relevant isomeric species of proteinogenic glutamic acid: A quantum- mechanical computational study.
- 6 – Computational rotational– vibrational spectroscopic analysis of isomeric species in the interstellar gas-phase stereoinversion of amino acid threonine.
- 7 – Mechanism and Kinetics of the Gas-Phase Stereoinversion Proteinogenic L- Threonine and Its Astrophysical Relevance.
- 8 – Gas-Phase Stereoinversion in Aspartic Acid: Reaction Pathways, Computational Spectroscopic Analysis, and Its Astrophysical Relevance.
- 9 – Arsenic(III) complexes of substituted diphenyl dithiophosphate: Synthesis, characterization, single crystal X-ray, DFT, and hirshfeld surface analysis.
- 10 – Synthesis, single crystal X-ray, DFT and HSA of N-donor stabilized complexes of cobalt(II) diphenyldithiophosphate: An experimental and theoretical approach and theoretical approach.



11 – An insight into non covalent interactions in the tetraphenylarsonium dithiophosphates: Synthesis, DFT and Hirshfeld Surface Analysis.

TESI DI DOTTORATO: Computational Quantum- Mechanical Approach to Study Stereoinversion in Astrophysically Relevant Chiral Amino Acids

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

Il candidato presenta una produzione scientifica complessiva, risultante dal curriculum, pari a n. 11 pubblicazioni, svolta nell'arco di 4 anni effettivi.

A handwritten signature in black ink is positioned over a solid black rectangular redaction box. The signature is stylized and appears to be a cursive name.

PROCEDURA PUBBLICA DI SELEZIONE PER IL RECLUTAMENTO DI N. 1 RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO AI SENSI DELL'ART.24, COMMA 3, LETT. A) DELLA LEGGE 240/2010 PRESSO LA SCUOLA NORMALE SUPERIORE - SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE CHIM/02 *CHIMICA FISICA*, BANDITA CON D.D. N.232 DEL 31.03.2022.

PUNTEGGIO DEI TITOLI E DELLE PUBBLICAZIONI DEI CANDIDATI
E GIUDIZIO SULL'ACCERTAMENTO DELLA CONOSCENZA DELLA LINGUA STRANIERA

1) **CANDIDATO:** *Alessandrini Silvia*

TITOLI

Titoli valutabili	Max punti 40
dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari, conseguito in Italia o all'Estero dal titolo <i>Modelling Weak Interactions in the Gas Phase: From Rotational Spectroscopy to Reaction Rates Using Accurate Quantum-Chemical Approaches</i>	punti 10 in quanto attinente



attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero svolta: 1 – Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale in inglese "Photochemistry and Molecular Materials" per l'anno 2019/2020 (2h) CHIM/02. 2 – Assistente al Laboratorio del corso di "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in "Chimica" per l'anno 2019/2020 (6h) CHIM/02. 3 – Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale in inglese "Photochemistry and Molecular Materials" per l'anno 2020/2021 (4h) CHIM/02. 4 – Attività di Tutor per il modulo 2 del corso "Metodi Spettroscopici" della Laurea Triennale in Chimica e Chimica dei Materiali per l'anno 2020/2021 (32h) CHIM/02. 5 – Assistente al Laboratorio del corso di "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in "Chimica" per l'anno 2020/2021 (12h) CHIM/02. 6 – Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale inglese "Photochemistry and Molecular Materials" per l'anno 2021/2022 (2h) CHIM/02. 7 – Lezione di 2h riguardo i sistemi non-covalenti per il primo anno del corso di dottorato in "Molecular Sciences for Earth and Space" (MOSES) della Scuola Superiore Meridionale. 8 – Attività di Tutor per il modulo 2 del corso "Metodi Spettroscopici" della Laurea Triennale in Chimica e Chimica dei Materiali per l'anno 2021/2022 (32h) CHIM/02. 9 – Attività di Tutor per il corso "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della Laurea Magistrale in Chimica per l'anno 2021/2022 (16h) CHIM/02.	punti 2 in quanto attività integrativa e di supporto equivalente a 4 a.a.
documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri: 1 – University of Mainz, Germania (3 mesi). 2 – University of Oxford, Regno Unito (4 mesi). 3 – Sincrotrone SOLEIL, Parigi 2021 (5 giorni). 4 – Sincrotrone SOLEIL, Parigi 2022 (1 giorno).	punti 0.5 di cui:
per la valorizzazione delle esperienze di mobilità	punti 0
per gli ulteriori criteri di valutazione previsti	punti 0.5

organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi: 1 – Rotational and Computational Spectroscopy dell'Università di Bologna, P.I. Prof.ssa Cristina Puzzarini. 2 – SMART@SNS, P.I. Prof. Vincenzo Barone. 3 – Gruppo di chimica Teorica del prof. Jurgen Gauss. 4 – Gruppo di chimica Teorica del prof. David P. Tew.	punti 3 per la partecipazione a n.2 gruppi di ricerca internazionali e n.2 nazionali
titolarità di brevetti	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito
relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali: 1 – Winter Modeling 2019- Special Edition on Valentine's Day (invited). 2 – 4th COST-MOLIM General Meeting. 3 – Young Reaserchers Meet Molecular Spectroscopy. 4 – VI Congresso della Divisione di Chimica Teoria e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana (SCI). 5 – Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation (VS-CTC) (invited). 6 – International Symposium on Molecular Spectroscopy, Topic: Structure Determination. 7 – Merck Young Chemists' Symposium (MYCS). 8 – Winter Modeling 2022. 9 – COSPAR 44th Scientific Assembly.	punti 5 in quanto n. 2 relazioni ad invito e 7 orali
premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca: 1 – Miglior poster al Meeting AstrochemII - 2 Italian Workshop on Astrochemistry "Chemical Evolution in our Galaxy: Spectroscopy, Observations and Reactivity" 2 – Miglior pubblicazione nel campo dello sviluppo metodologico assegnato dalla Divisione di chimica teorica e computazionale (DCTC) della società chimica italiana (SCI)	punti 2 in quanto n. 2 premi
PUNTEGGIO COMPLESSIVO TITOLI	
Punti 22.5	

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI	Criteri/Punti				Totale max punti 60
	a) originalità ecc.	b) congruenza	c) rilev.scientif.coll.edit	d) apporto individuale	



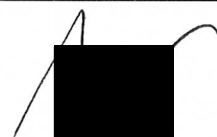
Alessandrini, Silvia, Gauss, Jürgen, Puzzarini, Cristina* (2018). J. Chem. Theory Comput. , vol. 14, p. 5360-5371	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0.5	Punti 4.5
Obenchain, Daniel A., Spada, Lorenzo, Alessandrini, Silvia, Rampino, Sergio, Herbers, Sven, Tasinato, Nicola, Mendolicchio, Marco, Kraus, Peter, Gauss, Jürgen, Puzzarini, Cristina, Grabow, Jens- Uwe,* Barone, Vincenzo* (2018). Ang. Chemie. Int. Ed. , vol. 57, p. 15822-15826	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
Wang J., Spada L., Chen J., Gao S., Alessandrini S., Feng G.*, Puzzarini C.,* Gou Q.,* Grabow J. - U., Barone V.* (2019). Ang. Chemie. Int. Ed. , vol. 58, p. 13935-13941	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
S. Alessandrini,* V. Barone,* C. Puzzarini,* Extension of the “Cheap” Composite Approach to Noncovalent Interactions: The jun-ChS Scheme, J. Chem. Theory Comput. 2020, 16, 988–1006	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 4
J. Lei, S. Alessandrini, J. Chen, Y. Zheng, L. Spada,* Q. Gou,* C. Puzzarini, V. Barone,* Molecules 2020, 25, 4899	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 3
Alessandrini S.,* Tonolo F., Puzzarini C. (2021). J. Chem. Phys. , vol. 154, p. 054306-1-054306-8.	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 4



V. Barone, S. Alessandrini, M. Biczysko, J. R. Cheeseman, D. C. Clary, A. B. McCoy, R. J. DiRisio, F. Neese, M. Melosso, C. Puzzarini.* Nat Rev Methods Primers 2021, 38, 1.	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
S. Alessandrini,* M. Melosso, Front. Astron. Space Sci 2021, 8, 159.	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 4
Lupi J., Alessandrini S., Puzzarini C.,* Barone V.* (2021). J. Chem. Theory Comput. , vol. 17, p. 6974-6992, ISSN: 1549-9618	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 3
Melosso M.,* Bizzocchi L., Gazzeh H., Tonolo F., Guillemin J. -C., Alessandrini S., Rivilla V. M., Dore L., Barone V., Puzzarini C.* (2022). Chem. Comm. , vol. 58, p. 2750-2753, ISSN: 1359-7345	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
Li X., Spada L., Alessandrini S., Zheng Y., Lengsfeld K. G., Grabow J. -U., Feng G.,* Puzzarini C., Barone V.* (2022). Ang. Chemie. Int. Ed. , vol. 61, p. e202113737	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
L. Bizzocchi,* S. Alessandrini,* M. Melosso,* C. Puzzarini,* Phys. Chem. Chem. Phys. , 2022, In press.	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 4

PUNTEGGIO COMPLESSIVO PUBBLICAZIONI	Punti 46.5
--	-------------------

PUNTEGGIO TOTALE TITOLI E PUBBLICAZIONI	Punti 69
--	-----------------



ACCERTAMENTO CONOSCENZA LINGUA INGLESE

GIUDIZIO	Ottimo
----------	--------

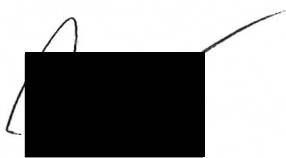
2) CANDIDATO: Arvanitidis Athanasios

TITOLI

Titoli valutabili	Max punti 40
dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti in Chimica, conseguito in Italia o all’Estero dal titolo <i>Visions of aromaticity From boron clusters to conjugated polycyclic hydrocarbons</i>	punti 10 in quanto attinente
attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero svolta: 1 – E04Q8sA, Introduction Labs for Biomedical students and Dentists (Wet Lab). 2 – CH3204 Symmetry, Spectroscopy and Quantum Mechanics (Computer Lab, Master Level). 3 – C9540 - Introduction to Computational Quantum Chemistry (Computer Lab, Master Level).	punti 4 in quanto n. 3 corsi di insegnamento
documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito
per la valorizzazione delle esperienze di mobilità	punti 0
per gli ulteriori criteri di valutazione previsti	punti 0
organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito
titolarità di brevetti	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito
relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali: 1 – EUCCO-CC9	punti 0.5 in quanto n.1 relazione orale
premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca:	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito
PUNTEGGIO COMPLESSIVO TITOLI	Punti 14.5

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI	Criteri/Punti				Totale max punti 60
	a) originalità ecc.	b) congruenza	c) rilev.scientif.coll.edit .	d) apporto individuale	
Issofa Patouossa, Athanasios G.Arvanitidis, JulesTshishimbi Muya, Minh Tho Nguyen and Arnout Ceulemans,* Phys.Chem.Chem.Phys. , 2019,21,729-735	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 3
Arvanitidis, AG,* Lim , KZ, Havenith, RW A, Ceulemans, A. Int J Quantum Chem. 2018; 13:e25575.	Punti 1	Punti 1	Punti 0.5	Punti 1	Punti 3.5
Athanasios G. Arvanitidis, Eva R.J . Vandaele, Marek Szopa, and Arnout Ceulemans,* J. Phys. Chem. A 2017, 121, 38, 7246-7254	Punti 1	Punti 1	Punti 0.5	Punti 0	Punti 2.5
Eva R J Vandaele, Athanasios Arvanitidis and Arnout Ceulemans 2017 J.Phys.A:Math.Theor. 50 114002	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 3
Arnout Ceulemans* and Athanasios G. Arvanitidis, Bull. Chem. Soc. Jpn. , 2015 88:11, 1553-1560	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 3
Athanasios G.Arvanitidis, Truong Ba Tai, Minh Tho Nguyen, and Arnout Ceulemans, Phys.Chem.Chem.Phys. , 2014,16, 18311-18318	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 0.5	Punti 3.5



Yioti,E.G.,Mati,I.K.,Arvanitidis,A.G.,Massen,Z.S.,Alexandraki,E.S.,Gallos,J.K., <i>Synthesis</i> , 1, 142, 2011	Punti 0	Punti 0.5	Punti 1	Punti 0	Punti 1.5
---	---------	-----------	---------	---------	-----------

PUNTEGGIO COMPLESSIVO PUBBLICAZIONI	Punti 20.0
--	-------------------

PUNTEGGIO TOTALE TITOLI E PUBBLICAZIONI	Punti 34.5
--	-------------------

ACCERTAMENTO CONOSCENZA LINGUA INGLESE

GIUDIZIO	Ottimo
----------	--------

3) CANDIDATO: *Mendolicchio Marco*

TITOLI

Titoli valutabili	Max punti 40
dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari, conseguito in Italia o all'Estero dal titolo <i>Development and implementation of theoretical models for the prediction of molecular structures and vibrational spectra</i>	punti 10 in quanto attinente



attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero svolta: 1 – Corso: Seminari sulle frontiere della chimica Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2022. 2 – Corso: Seminari alle frontiere dell'astrochimica Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 2 Scuola Superiore Meridionale (Napoli) 2022. 3 – Corso: Astrochemistry and Molecular Astrophysics Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 20 Scuola Normale Superiore (Italia) 2021/22. 4 – Corso: Scientific Programming Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 20 Scuola Normale Superiore (Italia) 2020/21. 5 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 13 Scuola Normale Superiore (Italia) 2020/21. 6 – Corso: Scientific Programming Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 12 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019/20. 7 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 12 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019/20. 8 – Corso: Scientific Programming Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 16 Scuola Normale Superiore (Italia) 2018/19. 9 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 13 Scuola Normale Superiore (Italia) 2018/19. 10 – Corso: 106° Corso di Orientamento Universitario della Scuola Normale Superiore di Pisa, svolto a San Miniato (Italia) Ruolo: Tutor Ore di didattica frontale: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019. 11 – Corso: Computational Spectroscopy Ruolo: Assistente alla didattica Numero di ore: 9 Scuola Normale Superiore (Italia) 2017/18. 12 – Corso: 103° Corso di Orientamento Universitario della Scuola Normale Superiore di Pisa, svolto a Follonica (Italia) Ruolo: Tutor Ore di didattica frontale: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2019. 13 – Corso: Theoretical Models for the Simulation of Vibrational Spectra Ruolo: Visiting professor Numero di ore: 8 Università di Pisa (Italia) 2017/18. 14 – Corso: 101° Corso di Orientamento Universitario della Scuola Normale Superiore di Pisa, svolto a San Miniato (Italia) Ruolo: Tutor Ore di didattica frontale: 2 Scuola Normale Superiore (Italia) 2017.	punti 4 in quanto n. 2 corsi di insegnamento e attività integrativa e di supporto equivalente a 5 a.a.
---	--

documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri: 1 – Haraldvollen Senter (Norvegia) 2019 (5 giorni). 2 – Wissenschaftspark Gelsenkirchen (Germania) 2018 (6 giorni).	punti 0 di cui:
per la valorizzazione delle esperienze di mobilità	punti 0
per gli ulteriori criteri di valutazione previsti	punti 0
organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi: 1 – Centro DreamsLab (Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia) 2012-2016. 2 – Laboratorio SMART (Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia) dal 2016. 3 – ERC ADVANCED GRANT DREAMS (Development of a Research Environment for Advanced Modelling of Soft matter) 2013-2018. 4 – PRIN 2015 “STARS in the CAOS, Simulation Tools for Astrochemical Reactivity and Spectroscopy in the Cyberinfrastructure for Astrochemical Organic Species” 2017-2020. 5 – ASI17_BARONE: Vita nello Spazio: origine, presenza, persistenza della vita nello spazio, dalle molecole agli estremofili 2019-2022. 6 – MIUR_PRIN17_BARONE - Physico-chemical Heuristic Approaches: Nanoscale Theory Of Molecular Spectroscopy (PHANTOMS) 2019-2022. 7 – Astrochemistry – Materials under extreme conditions: clues from the gas phase (INSTM-UniBO-SNS joint PROJECT@SKIES- VILLAGE), progetto congiunto INSTM-UNIBO-SNS dal 2021.	punti 4 in quanto n. 1 gruppi di ricerca internazionali e n. 6 nazionali
titolarità di brevetti	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito



relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali: 1 – Workshop DCTC 2022. 2 – Winter Modeling 2022. 3 – Merck Young Chemists' Symposium 2021. 4 – XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2021. 5 – Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation (VS-CTC) 2020. 6 – VI Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana 2019. 7 – 12th European Conference on Computational and Theoretical Chemistry 2019. 8 – Young Researchers Meet Spectroscopy – YRMS@2019. 9 – Winter Modeling 2019. 10 – VI Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana 2018. 11 – European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS) 2018. 12– Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM) 2018. 13 – Astrochem2@2018 – II Italian Workshop on Astrochemistry “Chemical Evolution in our Galaxy: Spectroscopy, Observations and Reactivity” 2018. 14 – ASTRO-Winter Modeling Advances in computational & experimental modeling: Application to Astrochemistry 2018. 15 – XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2017.	punti 5 in quanto n. 15 relazioni orali
premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca: 1 – Premio Pier Luigi Nordio 2017	punti 1 in quanto n. 1 premio a carattere nazionale
PUNTEGGIO COMPLESSIVO TITOLI	
Punti 22	

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI	Criteri/Punti				Totale max punti 60
	a) originalità ecc.	b) congruenza	c) rilev.scientif.coll.edit .	d) apporto individuale	
Mendolicchio M., Bloino J., Barone V.* (2021). J. Chem. Theory Comput. , vol. 17, p. 4332-4358	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4



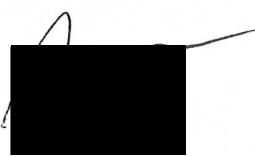
Yang, Qin, Mendolicchio, Marco, Barone, Vincenzo, Bloino, Julien* (2021). Frontiers in Astronomy and Space Sciences , vol. 8, 665232	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
Yexu, He, Mendolicchio, Marco, Kruse, Holger, Puzzarini, Cristina, Biczysko, Malgorzata,* Barone, Vincenzo* (2020). J. Molec. Struct. , vol. 1211, 127933	Punti 2	Punti 1	Punti 0.5	Punti 0	Punti 3.5
Gorai P.,* Sil M.,* Das A.,* Sivaraman B., Chakrabarti S. K., Ioppolo S.,* Puzzarini C.,* Kanuchova Z., Dawes A., Mendolicchio M., Mancini G., Barone V.,* Nakatani N., Shimonishi T., Mason N. (2020). Acs Earth and Space Chemistry , vol. 4, p. 920-946	Punti 2	Punti 1	Punti 0.5	Punti 0	Punti 3.5
Mendolicchio M., Baiardi A., Fronzoni G., Stener M., Grazioli C., De Simone M., Barone V.* (2019). J. Chem. Phys. , vol. 151, ISSN: 0021-9606	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
Obenchain, Daniel A., Spada, Lorenzo, Alessandrini, Silvia, Rampino, Sergio, Herbers, Sven, Tasinato, Nicola, Mendolicchio, Marco, Kraus, Peter, Gauss, Jürgen, Puzzarini, Cristina, Grabow, Jens-Uwe,* Barone, Vincenzo* (2018). Ang. Chemie. Int. Ed. , vol. 57, p. 15822-15826	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4



Melli, Alessio, Melosso, Mattia, Tasinato, Nicola, Bosi, Giulio, Spada, Lorenzo, Bloino, Julien, Mendolicchio, Marco, Dore, Luca, Barone, Vincenzo, Puzzarini, Cristina (2018). Astrophys. J. , vol. 855	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
D. Licari, M. Fusè, A. Salvadori, N. Tasinato, M. Mendolicchio, G. Mancini, V. Barone* (2018). Phys. Chem. Chem. Phys. , vol. 20, p. 26034-26052	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
Mendolicchio M., Penocchio E., Licari D., Tasinato N., Barone V.* (2017). J. Chem. Theory Comput. , vol. 13, p. 3060- 3075	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
Gianturco F. A., Satta M., Mendolicchio M., Palazzetti F., Piserchia A., Barone V., Wester R. (2016). Astrophys. J. , vol. 830	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4
Penocchio E., Mendolicchio M., Tasinato N., Barone V.* (2016). Can. J. Chem. , vol. 94, p. 1065-1076	Punti 2	Punti 1	Punti 0.2	Punti 0	Punti 3.2
Baiardi A., Mendolicchio M., Barone V.,* Fronzoni, G., Cardenas Jimenez G. A., Stener M., Grazioli C., De Simone M., Coreno, M. (2015). J. Chem. Phys. , vol. 143	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 4

PUNTEGGIO COMPLESSIVO PUBBLICAZIONI	Punti 46.2
--	-------------------

PUNTEGGIO TOTALE TITOLI E PUBBLICAZIONI	Punti 70.2
--	-------------------



ACCERTAMENTO CONOSCENZA LINGUA INGLESE

GIUDIZIO	Ottimo
----------	--------

4) CANDIDATO: Rani Namrata

TITOLI

Titoli valutabili	Max punti 40
dottorato di ricerca di ricerca o equipollenti in Chimica, conseguito in Italia o all'Estero dal titolo <i>Computational Quantum- Mechanical Approach to Study Stereoinversion in Astrophysically Relevant Chiral Amino Acids</i>	punti 10 in quanto attinente
attività didattica a livello universitario in Italia o all'Estero svolta: 1 – B.Sc. (Organic Chemistry/Inorganic Chemistry/ General Chemistry Practical) Teaching Hours: 19 hr per week (theory + practical) Purely on Ad hoc basis. 2 – B.Sc. (General Chemistry Practical) Teaching Hours: 6 hr per week Teaching Assistantship (Voluntarily). 3 – B.Sc. (Physical Chemistry theory / General Chemistry Practical) Teaching Hours: 19 hr per week (theory + practical) Purely on Ad hoc basis.	punti 4 in quanto equivalente a n. 2 corsi di insegnamento
documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri: 1 – Department of Chemistry, Panjab University, Chandigarh - INDIA 2016-2018. 2 – Department of Chemistry, Panjab University, Chandigarh - INDIA 2018-2021.	punti 6 di cui:
per la valorizzazione delle esperienze di mobilità	punti 0
per gli ulteriori criteri di valutazione previsti	punti 6
organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito
titolarità di brevetti	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito



relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali: 1 – International Conference on Recent Advances in Applied Sciences (ICRAAS-2022). 2 – Indian Planetary Science Conference (IPSC-2022). 3 – 75th International Symposium on Molecular Spectroscopy (ISMS) {virtual}. 4 – ‘RCP’-National Symposium on ‘Chemistry and Interdisciplinary Sciences’. 5 – <i>RCP’-National Symposium</i> on ‘Current Advances in Chemical Sciences.	punti 2.5 in quanto 5 comunicazioni orali
premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca	punti 0 in quanto non vengono presentati titoli in merito
PUNTEGGIO COMPLESSIVO TITOLI	Punti 22.5

PUBBLICAZIONI

PUBBLICAZIONI VALUTABILI	Criteri/Punti				Totale max punti 60
	a) originalità ecc.	b) congruenza	c) rilev.scientif.coll.edit	d) apporto individuale	
Rani, N., PhD Thesis , Panjab University: Chandigarh, India, 2020]	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 5
Rani, N. (2021). Astrophysics and Space Science , 366(4), 1- 9.	Punti 1	Punti 1	Punti 0.2	Punti 1	Punti 3.2
Rani, N. (2021). Life sciences in space research , 30, 29-38.	Punti 1	Punti 1	Punti 0.5	Punti 1	Punti 3.5
Rani, N. (2020). ChemPhysChem , 21(11), 1107- 1118.	Punti 2	Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 5
Rani, N. (2020). Molecular Astrophysics , 18, 100061.	Punti 1	Punti 1	Punti 0.2	Punti 1	Punti 3.2
Rani, N. (2020). Journal of Molecular Spectroscopy , 369,	Punti 1	Punti 1	Punti 0.2	Punti 1	Punti 3.2

111271.

Rani, N. (2019).
Molecular Astrophysics,
15, 8-16.

Rani, N., & Vikas*.
(2018). **The Journal of
Physical Chemistry A**,
122(38), 7572-7586.

Kaur, R., Rani, N., &
Vikas. (2018). **ACS
omega**, 3(10), 14431-
14447.

Radha, A., Sharma, D.,
Kumar, P., Sood, P., Rani,
N., Vikas, & Kumar
Pandey, S.* (2020).
**Journal of Coordination
Chemistry**, 73(3), 467-
484.

Sharma, D., Radha, A.,
Kumar, S., Jassal, A. K.,
Rani, N., & Pandey, S.
K.* (2020). **Journal of
Molecular Structure**,
1207, 127835.

Radha, A., Kumar, P.,
Firdoos, T., Sood, P.,
Rani, N., & Pandey, S. K.
(2021). **Journal of
Molecular Structure**,
1229, 129729.

Punti 1	Punti 1	Punti 0.2	Punti 1	Punti 3.2
Punti 2	Punti 1	Punti 0.5	Punti 0.5	Punti 4
Punti 1	Punti 1	Punti 1	Punti 0	Punti 3
Punti 1	Punti 1	Punti 0.2	Punti 0	Punti 2.2
Punti 1	Punti 1	Punti 0.5	Punti 0	Punti 2.5
Punti 1	Punti 1	Punti 0.5	Punti 0	Punti 2.5

PUNTEGGIO COMPLESSIVO PUBBLICAZIONI	Punti 40.5
--	-------------------

PUNTEGGIO TOTALE TITOLI E PUBBLICAZIONI
--

Punti 63

ACCERTAMENTO CONOSCENZA LINGUA INGLESE

GIUDIZIO

Ottimo

