

**PROCEDURA VALUTATIVA PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE DI SECONDA FASCIA PRESSO LA CLASSE DI SCIENZE PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 *MODELLO E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE*, S.S.D. CHIM/02 *CHIMICA FISICA AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 6, LEGGE N.240/2010, BANDITA CON D.D. N.760 DEL 16.11.2021***

**Verbale n.2  
(valutazione e giudizi collegiali)**

L'anno duemilaventidue, il giorno 10 del mese di Febbraio alle ore 10, si riunisce al completo per via telematica la Commissione della procedura valutativa indicata in epigrafe, nominata con D.D. n. 39 del 18.01.2022, composta da:

- Prof. Marchese Leonardo, professore ordinario presso l'Università del Piemonte Orientale, nell'ambito del settore scientifico disciplinare CHIM/02;
- Prof.ssa Menziani Maria Cristina, professore ordinario presso l'Università di Modena e Reggio Emilia, nell'ambito del settore scientifico disciplinare CHIM/02;
- Prof.ssa Milioto Stefana, professore ordinario presso l'Università di Palermo, nell'ambito del settore scientifico disciplinare CHIM/02.

La Commissione ha accertato che ciascun componente è in condizione di avvalersi di strumenti telematici di lavoro collegiale, di cui fa uso esclusivo e protetto, idonei a consentire la comunicazione in tempo reale e il collegamento tra i partecipanti alla riunione, nonché la visione degli atti e lo scambio di documenti.

La Commissione, dopo lo svolgimento della seduta preliminare in cui ha fissato i criteri di valutazione, ha chiesto agli uffici l'elenco dei candidati che hanno presentato domanda di partecipazione alla selezione e prende atto che il solo ricercatore della Scuola da valutare è il dott. Giuseppe Brancato,

. Ognuno dei componenti della Commissione dichiara di non avere relazioni di parentela e affinità entro il IV grado incluso con gli altri commissari e con il candidato (art.5, comma 2 del D. Lgs 1172/1948) e che non sussistono le cause di astensione di cui agli artt.51 e 52 del c.p.c. (dichiarazioni indicate in calce al verbale).

La Commissione passa quindi alla fase di valutazione delle attività del candidato prendendo in considerazione la seguente documentazione trasmessa dagli uffici competenti:

- la domanda e il *curriculum* del candidato comprensivo dell'indicazione delle attività didattiche, di ricerca, accademico-istituzionali, di servizio e di terza missione svolte, con l'elencazione complessiva di tutti i titoli posseduti e dell'intera propria produzione scientifica;
- le pubblicazioni presentate dal candidato, nel limite di 12 previsto dal bando;
- le informazioni relative agli esiti delle valutazioni studentesche.

Riguardo alla predetta documentazione, la Commissione ritiene che i titoli desumibili dal *curriculum* del candidato allegato alla domanda (**allegato 1**) e le pubblicazioni presentate nel limite di 12, di cui all'elenco parimenti allegato al presente verbale (**allegato 2**), siano tutti valutabili ad esclusione dei seguenti per le ragioni indicate:

- Borsa di Dottorato (parte II.6 del CV) del curriculum non valutabile in quanto percepita in qualità di Dottorando di ricerca.
- Pubblicazioni n 65, 66 e 67 (parte III del CV, Produzione scientifica complessiva) in quanto under review o sottomessi.

Dopo attenta analisi della predetta documentazione, al termine delle attività di valutazione svolte in conformità ai criteri previsti e a seguito di approfondita discussione, la Commissione redige la motivata relazione allegata (**allegato 3**), che fa parte integrante del presente verbale, in cui la medesima Commissione formula all'unanimità il proprio giudizio collegiale in conformità con quanto richiesto dall'art.6, comma 2 del Bando, utilizzando la seguente scala di giudizio come stabilito nella seduta preliminare: **insufficiente, sufficiente, discreto, buono, ottimo.**

Come risulta dalla predetta motivata relazione allegata, la Commissione, al termine delle proprie valutazioni e dei giudizi espressi, con deliberazione assunta all'unanimità dei componenti ha espresso il proprio parere favorevole al superamento con esito positivo, da parte del dott. Giuseppe Brancato la presente procedura valutativa di cui all'art. 24, comma 6 della Legge 240/2010 che proseguirà, pertanto, con la successiva fase di chiamata ai sensi dell'art. 6, comma 4 del Bando di indizione della procedura.

Terminati i propri lavori, la Commissione dà mandato al Segretario di inviare all'attenzione del Direttore della Scuola Normale Superiore, unitamente ad apposita nota di trasmissione degli atti, il presente verbale, completo dei suoi allegati, insieme alle dichiarazioni di adesione al verbale della riunione telematica degli altri due commissari, datate e sottoscritte.

La seduta ha termine alle ore 11:30

Letto, approvato e sottoscritto

PER LA COMMISSIONE, Prof.ssa Maria Cristina Menziani

Luogo Modena, data 10/02/2022

**ALLEGATO n.1**

***CURRICULUM DEL RICERCATORE***

Si allega il CV presentato dal candidato per la procedura di cui trattasi

**ALLEGATO n.2**

***ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI PRESENTATE***

Si allega l'elenco delle pubblicazioni presentate dal candidato per la procedura di cui trattasi.

**PROCEDURA VALUTATIVA PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE DI SECONDA FASCIA PRESSO LA CLASSE DI SCIENZE PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 *MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE*, S.S.D. CHIM/02 *CHIMICA FISICA AI SENSI DELL'ART. 24, COMMA 6, LEGGE N.240/2010*, BANDITA CON D.D. N.760 DEL 16.11.2021**

**MOTIVATA RELAZIONE SUL RICERCATORE ESAMINATO  
E GIUDIZIO COLLEGIALE DELLA COMMISSIONE**

La Commissione osserva preliminarmente che il candidato dott. Giuseppe Brancato è ricercatore a tempo indeterminato presso la Classe di Scienze della Scuola Normale Superiore dal 1° ottobre 2011 con inquadramento nel settore concorsuale e scientifico-disciplinare oggetto della procedura ed è in possesso di abilitazione scientifica nazionale per lo svolgimento di funzioni di professore universitario di II fascia in corso di validità nello stesso settore concorsuale.

Quanto sopra premesso, la Commissione procede ad esprimere il proprio giudizio collegiale sulle attività svolte dal dott. Brancato per ciascuno degli ambiti di valutazione di cui ai punti I. II. III. e IV. dell'art. 5, comma 2 e seguenti del Bando della procedura valutativa, articolato e di merito secondo i criteri/parametri previsti, nonché un giudizio sintetico graduato secondo la scala di valutazione specificata nella seduta preliminare.

**I. Valutazione dell'attività didattica, di didattica integrativa e di servizio agli studenti**

Con riferimento alla valutazione dell'attività didattica, di didattica integrativa e di servizio agli studenti la Commissione, facendo specifico riferimento ai criteri previsti, esprime il seguente giudizio collegiale:

- a) volume e continuità dell'attività didattica con particolare riferimento al numero dei moduli/corsi di insegnamento tenuti per anno di cui si è assunta la responsabilità. Eventuali esperienze di insegnamento e di coordinamento di programmi formativi presso atenei e istituti di ricerca di alta qualificazione, anche esteri o internazionali: *sotto questo profilo il candidato presenta una ampia e continua attività didattica, pienamente congruente con il Settore Concorsuale e settore scientifico disciplinare oggetto del posto di professore associato da ricoprire (titolare di 2 moduli in ciascun anno accademico presso la Scuola Normale Superiore di Pisa per 10 anni e titolare di 1 modulo in ciascun anno accademico dal 2016 ad oggi presso l'Ateneo di Pisa).*
- b) esiti della valutazione da parte degli allievi dei moduli/insegnamenti tenuti nei corsi ordinari e/o di dottorato (PHD), con gli strumenti predisposti dalla Scuola e secondo quanto riportato nelle relazioni annuali sulla valutazione della qualità della didattica: *tenuto conto delle informazioni prodotte, la Commissione constata il mancato raggiungimento delle soglie minime previste per poter considerare meritevoli di apprezzamento gli esiti delle valutazioni studentesche. Pertanto, all'unanimità, non esprime alcuna valutazione.*
- c) partecipazione alle commissioni istituite per gli esami di profitto e/o commissioni di valutazione del percorso formativo degli studenti e/o commissioni di ammissione al corso ordinario o di dottorato (PhD): *il candidato ha svolto un'ottima attività sia sotto il profilo quantitativo sia sotto il profilo della continuità avendo partecipato a 18 Commissioni di ammissione dall'AA 2012/13 ad oggi.*
- d) quantità e qualità dell'attività di tipo seminariale, di quella mirata alle esercitazioni e al tutoraggio degli studenti, ivi inclusa quella relativa alla supervisione delle tesi di laurea, di laurea magistrale e delle tesi di dottorato di cui il ricercatore è relatore: *sotto questo profilo il candidato ha evidenziato un'attività complessivamente molto buona essendo stato relatore di 5 tesi di dottorato, relatore di 2 tesi di laurea magistrale e avendo svolto attività di tutoraggio per due studenti.*

Alla luce di quanto sopra espresso, la Commissione ritiene che l'attività didattica, di didattica integrativa e di servizio agli studenti svolta dal dott. Giuseppe Brancato sia **ottima**.

**II. Valutazione dell'attività di ricerca scientifica**

Con riferimento alla valutazione dell'attività di ricerca scientifica la Commissione, facendo specifico riferimento ai criteri previsti, esprime il seguente giudizio collegiale:

- a) organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, ovvero partecipazione agli stessi. Eventuale capacità di attrazione di finanziamenti per la ricerca dimostrata attraverso la partecipazione con successo a bandi competitivi in qualità di coordinatore locale, nazionale o internazionale e/o la capacità di ideare nuove linee di indagine, contribuendo a promuovere ed ampliare la rete di collaborazioni scientifiche nazionali e internazionali: *sotto questo profilo il candidato ha svolto un'ottima attività essendo stato responsabile di unità di ricerca di un PRIN, di un FIRB, di un progetto INFN e di un progetto regionale; Principal Investigator (PI) di due progetti su fondi competitivi interni, un progetto del Ministero degli affari esteri e un progetto regionale, responsabile locale di un progetto UE2020; PI e co-PI di due progetti HPC-Cineca. Ha anche partecipato ad un progetto PRIN e un progetto INFN.*
- b) direzione di istituti culturali e di ricerca o di articolazioni interne degli stessi; direzione di riviste, collane editoriali, encyclopedie o partecipazione a comitati editoriali degli stessi: *sotto questo profilo il candidato non presenta titoli.*
- c) conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca: *sotto questo profilo il candidato non presenta titoli.*
- d) partecipazione in qualità di relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali e/o partecipazione all'organizzazione degli stessi: *sotto questo profilo il candidato ha svolto ampia attività essendo stato relatore su invito a 9 convegni internazionali e nazionali, relatore a un convegno nazionale. Inoltre ha partecipato all'organizzazione di 10 convegni internazionali.*
- e) attività di ricerca svolta sulla base di rapporti contrattuali o comunque formalizzati presso istituzioni di alta cultura, università, accademie ed enti di ricerca, pubblici e privati, italiani o stranieri, di alta qualificazione a livello nazionale e internazionale: *sotto questo profilo il candidato ha svolto una attività di ricerca continuativa post-dottorato dal 2002 al 2011 sia come borsista post-doc, senior post-doc e assegnista di ricerca presso università ed istituti di ricerca italiani ed esteri.*
- f) risultati ottenuti nel trasferimento tecnologico in termini di partecipazione alla creazione di spin off partecipati e non, conseguimento della titolarità di brevetti o impiego degli stessi: *sotto questo profilo il candidato non presenta titoli.*

Alla luce di quanto sopra espresso, la Commissione ritiene che l'attività di ricerca scientifica svolta dal dott. Giuseppe Brancato sia **buono**.

### **III. Valutazione delle pubblicazioni scientifiche**

Con riferimento alla valutazione delle pubblicazioni scientifiche la Commissione, facendo specifico riferimento ai criteri previsti, esprime il seguente giudizio collegiale:

#### **A) - Produzione scientifica complessiva**

La Commissione prende atto che la produzione scientifica del ricercatore consiste in 64 pubblicazioni prodotte nell'arco di 20 anni (censite dalla banca dati SCOPUS) e ritiene che la produzione complessiva sia consistente e pienamente congruente con il Settore Concorsuale e settore scientifico disciplinare oggetto del posto di professore associato da ricoprire. La Commissione ritiene inoltre che la produzione abbia continuità temporale e sia intensa con alcuni lavori di notevole impatto, alto è il numero di citazioni (pari a 1359) e ragguardevole il valore dell'indice di Hirsch pari a 22.

#### **B) – Pubblicazioni scientifiche presentate nel limite di 12 previsto dal bando**

Le pubblicazioni saranno esaminate secondo l'ordine riportato nell'elenco del candidato (Allegato 2).

### **Pubblicazione 1**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 28, IF: 9.83*): *ottima*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 2**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 6, IF: 3.24*): *buona*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 3**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 18, IF: 3.24*): *buona*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 4**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 59, IF: 2.99*): *ottima*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 5**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 27, IF: 5.16*): *ottima*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 6**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 13, IF: 3.77*): *buona*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 7**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*

- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 10, IF: 3.68*): *buona*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 8**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 18, IF: 4.38*): *ottima*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 9**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 0, IF: 3.68*): *buona*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 10**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 6, IF: 15.34*): *ottima*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 11**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 0, IF: 5.24*): *ottima*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

## **Pubblicazione 12**

- a) originalità, innovatività, rigore metodologico e rilevanza: *ottima*
- b) congruenza con il settore scientifico-disciplinare CHIM/02: *ottima*
- c) rilevanza scientifica della collocazione editoriale di ciascuna pubblicazione e sua diffusione all'interno della comunità scientifica (*N. di citazioni 0, IF: 3.68*): *buona*
- d) apporto individuale del candidato: *sostanziale*

Le 12 pubblicazioni sono complessivamente di prestigio e presentano un impact factor medio di 5.35. In tutte le 12 pubblicazioni il candidato è autore o co-autore di riferimento.

Alla luce di quanto sopra, la Commissione ritiene che la produzione scientifica complessiva del dott. Brancato e le pubblicazioni presentate siano **ottima**.

## **IV. Valutazione delle attività accademico-istituzionali di responsabilità, di servizio e/o di terza missione svolte**

Con riferimento alla valutazione delle attività accademico-istituzionali di responsabilità, di servizio e/o di terza missione svolte la Commissione, facendo specifico riferimento ai criteri previsti, esprime il seguente giudizio collegiale:

- a) cariche o incarichi accademici-istituzionali di responsabilità e/o di servizio formalmente conferiti dagli organi accademici: *sotto questo profilo la Commissione ritiene che il candidato abbia svolto una limitata attività come delegato per la SNS nel consiglio direttivo di due consorzi interuniversitari.*
- b) partecipazioni in qualità di componente a Commissioni/Comitati o altri organi a carattere collegiale di ateneo o di struttura accademica previsti da Regolamenti accademici per realizzare finalità di carattere istituzionale, organizzativo, gestionale e di servizio, quali il Comitato Unico di Garanzia, le Commissioni paritetiche, il Collegio dei docenti di corsi Ph.D., le Commissioni elettorali ecc.: *la Commissione ritiene che il candidato abbia svolto un'ottima attività accademico/istituzionale come membro del Collegio dei docenti di 5 diversi corsi di Ph.D. (dal 2013 al 2021), come componente della Conferenza di Ateneo, del Consiglio di Classe in Scienze, del Collegio Accademico (come rappresentante dei ricercatori), della commissione elettorale e del Comitato Unico di Garanzia.*
- c) svolgimento di attività di terza missione quali la partecipazione con interventi orali e/o assistenza nei corsi di orientamento universitari, la collaborazione didattica, organizzativa o l'intervento in programmi di divulgazione scientifica o in conferenze, dibattiti o altri eventi promossi dalla Scuola, o da altri atenei o soggetti pubblici o privati, e rivolti a un pubblico non specializzato, ecc.: *sotto questo profilo la Commissione e ritiene che il candidato abbia svolto una buona attività divulgativa con vari seminari e lezioni per un pubblico non specializzato presso la fondazione "I Lincei per la scuola" e la notte dei ricercatori.*

Dopo aver espresso le valutazioni parziali in relazione a ciascuno degli ambiti sopra indicati, tenendo conto delle stesse, la Commissione passa ad esprimere il proprio giudizio collegiale sulla congruità del livello di maturità scientifica e didattica del ricercatore con quello richiesto dall'art.9, comma 2 del Regolamento della Scuola per assumere il ruolo di professore di seconda fascia; tale disposizione prescrive che il livello del profilo dello studioso debba essere congruo “*con l'esigenza, propria della vocazione e strategia istituzionale della Scuola, di perseguire il più alto livello nelle attività di formazione e di ricerca che richiede ai propri docenti un livello di maturità scientifica e didattica - attestato dall'importanza delle tematiche affrontate, dei meriti scientifici e dei risultati raggiunti - significativamente più elevato di quello previsto per le procedure di abilitazione scientifica nazionale; un livello di maturità che sia in grado di contribuire a mantenere gli standard di eccellenza della Scuola nella didattica e nella ricerca nonché di promuoverne – nel medio-lungo termine - la visibilità, l'attrattività e la competitività anche internazionale*” e che in particolare, “*in caso di posti di professore di II fascia, sia tale da conferire al candidato una posizione già affermata nel panorama almeno nazionale della ricerca nonché possibilmente già riconoscibile anche sul piano internazionale*”.

A tale proposito la Commissione ritiene che il livello di maturità scientifica e didattica raggiunto dal dott. Giuseppe Brancato, rilevabile dal curriculum e dalle pubblicazioni presentate, attestato dalla documentazione esibita e dai risultati scientifici raggiunti, riconosciuti a livello internazionale, sia **pienamente congruo** con quello richiesto dalla Scuola ai propri associati e che possa contribuire a mantenere e aumentare gli standard di eccellenza della Scuola Normale nella ricerca e nella didattica.

La Commissione, infine sulla base di quanto sopra espresso, con deliberazione assunta all'unanimità dei componenti esprime il proprio parere favorevole al superamento con esito positivo della presente procedura valutativa da parte del dott. Giuseppe Brancato.

# CURRICULUM SCIENTIFICO PROFESSIONALE<sup>5</sup>

(allegato alla domanda, di cui costituisce parte integrante)

**DOTT. GIUSEPPE BRANCATO**  
(NOME E COGNOME)

## **Parte I – ATTIVITÀ DIDATTICA, DI DIDATTICA INTEGRATIVA E DI SERVIZIO AGLI STUDENTI** (art.5, comma 2 del bando)

**I.1 - Attività didattica svolta presso la Scuola Normale Superiore con particolare riferimento al numero dei moduli/corsi di insegnamento tenuti per anno di cui si è assunta la responsabilità:**

Periodo di svolgimento	Denominazione dell'insegnamento (specificando se corso o modulo)	n. ore di didattica frontale	Tipologia di attività formativa <sup>6</sup>
A.A. 2011-2012	Modulo di corso di "Introduzione alla Meccanica Quantistica e Statistica"	20	Corso per allievi ordinari del corso di laurea in Chimica
A.A. 2011-2012	Modulo di corso di "Modellistica Computazionale di Bio- e Nano-sistemi"	20	Corso per allievi ordinari del corso di laurea in Chimica
A.A. 2012-2013	Modulo di corso di "Introduzione alla Meccanica Quantistica e Statistica"	20	Corso per allievi ordinari del corso di laurea in Chimica
A.A. 2012-2013	Modulo di corso di "Modellistica Computazionale di Bio- e Nano-sistemi"	24	Corso per allievi ordinari del corso di laurea in Chimica
A.A. 2013-2014	Corso di "Seminari sulle Frontiere della Chimica"	25	Corso per allievi ordinari del corso di laurea in Chimica
A.A. 2013-2014	Modulo di corso di "Astrobiologia"	10	Corso per allievi ordinari e PhD del corso di laurea in Chimica / Scienze Biologiche / Fisica
A.A. 2014-2015	Titolare corso di "Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari"	40	Corso per allievi ordinari del corso di laurea in Chimica e per il PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari
A.A. 2014-2015	Modulo di corso di "Astrobiologia"	10	Corso per PhD del corso di laurea in Chimica / Scienze Biologiche / Fisica
A.A. 2015-2016	Titolare corso di "Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari"	40	Corso per allievi ordinari del corso di laurea in Chimica e per il PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari
A.A. 2015-2016	Modulo di corso di "Astrobiologia"	12	Corso del PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari / Neurobiologia / Fisica
A.A. 2016-2017	Titolare corso di "Computational Life and Material Sciences"	50	Corso per PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari e per corso di laurea magistrale Chimica e Materials & Nanotechnology
A.A. 2016-2017	Modulo di corso di "Astrobiologia"	12	Corso del PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari / Neurobiologia / Fisica
A.A. 2017-2018	Titolare corso di "Computational Life and Material Sciences"	50	Corso per PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari e per corso di laurea magistrale Chimica e Materials & Nanotechnology

5 Il presente curriculum scientifico professionale contiene l'elenco complessiva e circostanziata dei titoli posseduti dal candidato, ritenuti utili per la valutazione, seguendo uno schema-tipo che **tiene conto delle attività e dei criteri oggetto di valutazione da parte della Commissione che sono indicati dall'art.5, commi 2-5 del bando a cui si fa rinvio**. Tale schema può essere eventualmente modificato/integrato dal candidato adattandolo alle peculiarità della propria attività scientifico-professionale; gli spazi disponibili nello schema per le varie categorie di titoli elencate possono essere compilati o integrati dal candidato secondo le proprie esigenze, fermo restando che le categorie di titoli valutabili sono quelle indicate, conformemente a quanto previsto dal bando.

6 Indicare la tipologia di attività formativa nell'ambito della quale è stata svolta l'attività didattica (corso di laurea, di dottorato, master, summer school ecc.), specificando se si sia trattato di didattica ufficiale o integrativa

A.A. 2017-2018	Modulo di corso di "Astrobiologia"	12	Corso del PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari / Neurobiologia / Fisica
A.A. 2018-2019	Titolare corso di "Computational Life and Material Sciences"	50	Corso per PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari e per corso di laurea magistrale Chimica e Materials & Nanotechnology
A.A. 2018-2019	Modulo di corso di "Astrobiologia"	12	Corso del PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari / Astrochimica / Neurobiologia / Fisica
A.A. 2019-2020	Titolare corso di "Computational Life and Material Sciences"	50	Corso per PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari e per corso di laurea magistrale Chimica e Materials & Nanotechnology
A.A. 2019-2020	Modulo di corso di "Astrobiologia"	16	Corso del PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari / Astrochimica / Fisica
A.A. 2020-2021	Titolare corso di "Computational Life and Material Sciences"	50	Corso per per allievi ordinari del corso di laurea triennale in Chimica e per corso di laurea magistrale Materials & Nanotechnology
A.A. 2020-2021	Modulo di corso di "Astrobiologia"	16	Corso del PhD di Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari / Fisica

**I.2 - Esperienze di insegnamento e di coordinamento di programmi formativi presso atenei e istituti di ricerca di alta qualificazione, anche esteri o internazionali:**

Periodo di svolgimento (data inizio e data fine attività)	Ateneo o Istituto di ricerca di alta qualificazione	Breve descrizione dell'attività svolta <sup>7</sup>
dal 01/11/2016 al 31/10/2017	Università di Pisa	Titolare corso di "Computational Materials Science" – 48 ore
dal 01/11/2017 al 31/10/2018	Università di Pisa	Titolare corso di "Computational Materials Science" – 48 ore
dal 01/11/2018 al 31/10/2019	Università di Pisa	Titolare corso di "Computational Materials Science" – 48 ore
dal 01/11/2019 al 31/10/2020	Università di Pisa	Titolare corso di "Computational Materials Science" – 48 ore
dal 01/11/2020 al 31/10/2021	Università di Pisa	Titolare corso di "Computational Materials Science" – 48 ore
dal 01/11/2021 ad oggi	Università di Pisa	Titolare corso di "Computational Materials Science" – 48 ore

**I.3 - Partecipazione alle commissioni istituite dalla Scuola Normale Superiore per gli esami di profitto e/o commissioni di valutazione del percorso formativo degli studenti e/o commissioni di ammissione al corso ordinario o di dottorato (PHD):**

A.A. e/o periodo di svolgimento dell'attività di commissario	Tipologia di Commissione a cui si è partecipato <sup>8</sup>
A.A. 2012/2013	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario in Chimica per l'a.a. 2012/2013
A.A. 2012/2013	Commissione di ammissione al PhD in Chimica per l'a.a. 2012/2013
A.A. 2013/2014	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario in Chimica per l'a.a. 2013/2014

<sup>7</sup> Indicare in modo sufficientemente circostanziato gli elementi utili alla valutazione specificando l'attività svolta (svolgimento di corsi, lezioni, coordinamento programma di formazione), il titolo del corso/delle lezioni, numero delle eventuali ore di didattica frontale, ecc.

<sup>8</sup> Indicare in modo sufficientemente circostanziato gli elementi utili alla valutazione specificando di che tipo di commissione si sia trattato (colloqui per passaggio d'anno, esame finale conseguimento dottorato, esame di ammissione al corso ordinario o al corso di dottorato (PHD) in \_\_\_ ecc.

A.A. 2013/2014	Commissione di ammissione al PhD in Chimica per l'a.a. 2013/2014
A.A. 2014/2015	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario in Chimica per l'a.a. 2014/2015
A.A. 2014/2015	Commissione di ammissione al PhD in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari per l'a.a. 2014/2015
A.A. 2015/2016	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario in Chimica per l'a.a. 2015/2016
A.A. 2015/2016	Commissione di ammissione al PhD in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari per l'a.a. 2015/2016
A.A. 2016/2017	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario in Chimica per l'a.a. 2016/2017
A.A. 2016/2017	Commissione di ammissione al PhD in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari per l'a.a. 2016/2017
A.A. 2019/2020	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario magistrale in Materials & Nanotechnology per l'a.a. 2019/2020
A.A. 2019/2020	Commissione di passaggio d'anno 4 anno del corso ordinario magistrale in Materials & Nanotechnology per l'a.a. 2019/2020
A.A. 2020/2021	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario in Chimica per l'a.a. 2019/2020
A.A. 2020/2021	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario magistrale in Materials & Nanotechnology per l'a.a. 2020/2021
A.A. 2020/2021	Commissione di passaggio d'anno 4 anno del corso ordinario magistrale in Materials & Nanotechnology per l'a.a. 2020/2021
A.A. 2021/2022	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario in Chimica per l'a.a. 2021/2022
A.A. 2021/2022	Commissione di ammissione degli allievi al corso ordinario magistrale in Materials & Nanotechnology per l'a.a. 2021/2022
A.A. 2021/2022	Commissione di ammissione al PhD in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari per l'a.a. 2021/2022

**I.4 - Attività di tipo seminariale, attività mirata alle esercitazioni e al tutoraggio degli studenti, ivi inclusa quella relativa alla supervisione delle tesi di laurea, di laurea magistrale e delle tesi di dottorato di cui il ricercatore è relatore:**

A.A. e/o periodo di svolgimento dell'attività	Tipologia di attività svolta e/o breve descrizione della stessa <sup>9</sup>
inizio dall'A.A. 2012/2013 fino al 2016	relatore di tesi di PHD del dott. Danilo Di Maio, tesi su "Understanding the working mechanism of natural and engineered proteins for cell regulation and biotechnological applications: a molecular dynamics study"
inizio dall'A.A. 2013/2014 fino al 2017	relatore di tesi di PHD del dott. Muzaffer Ahmad, tesi su "New Fluorescent Tools For The Development of Advanced Vapochromic Films Based on Thermoplastic Polymers"
inizio dall'A.A. 2013/2014 fino al 2018	relatore di tesi di PHD del dott. Avinash Yadav, tesi su "Comprehensive Proteogenomics Identification and Validation of Cancer Associated Proteoforms in MCF7 cells"
inizio dall'A.A. 2015/2016 fino al 2019	relatore di tesi di PHD del dott. Muhammad Jan Akhunzada, tesi su "Understanding molecular phenomena and mechanisms occurring in the lipid membranes through molecular dynamics simulations"
inizio dall'A.A. 2018/2019 fino al 2019	relatore di tesi di laurea magistrale di Luca Sagresti, tesi su "Structure and dynamics of a dye-labeled lipid in a model membrane bilayer: a computational study"
inizio dall'A.A. 2020/2021 fino al 2021	relatore di tesi di laurea magistrale di Alfonso Ferretti, tesi su "Graphene Oxide Functionalization with Maleimide Through Diels-Alder Cycloaddition Reaction: A Computational Study"
inizio dall'A.A. 2019/2020 fino ad oggi	supervisore di tesi di PhD del dott. Luca Sagresti, tesi su "Multiscaling approaches for studying ion solvation and transport in protein channels"
inizio dall'A.A. 2019/2020 fino al 2020	Tutoraggio per passaggio 4 anno Materials & Nanotechnology di Lorenzo Peri
inizio dall'A.A. 2020/2021 fino al 2021	Tutoraggio per passaggio 4 anno Materials & Nanotechnology di Giuseppe Sacco

<sup>9</sup> Indicare in modo sufficientemente circostanziato gli elementi utili alla valutazione specificando l'attività svolta: relatore tesi di dottorato o tutor indicando il nominativo dell'allievo/dottorando seguito e l'argomento della tesi; esercitazioni indicando l'argomento e i destinatari dell'attività (allievi/dottorandi), ecc.

## **Parte II - ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA**

(art.5, comma 3 del bando)

**II.1 - Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi** (indicata con riferimento anche alla capacità di attrazione di finanziamenti per la ricerca dimostrata attraverso l'eventuale partecipazione con successo a bandi competitivi in qualità di coordinatore locale, nazionale o internazionale e/o alla capacità di ideare nuove linee di indagine, contribuendo a promuovere ed ampliare la rete di collaborazioni scientifiche nazionali e internazionali)

<b>Periodo di svolgimento (data inizio e data fine attività)</b>	<b>Gruppo/programma di ricerca<sup>10</sup></b>	<b>Ruolo ricoperto e breve descrizione dell'attività<sup>11</sup></b>
dal 08/03/2012 al 08/03/2016	MIUR FIRB Futuro in ricerca "SUPRAmolecularly Templated Synthesis of Homochiral CARBON Nanotubes for Photovoltaic Applications" – PI prof. Davide Bonifazi	Responsabile unità di ricerca. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Costo: 231K euro.
dal 11/07/2013 al 15/11/2015	Ministero degli Affari Esteri Progetto bilaterale Italia-Serbia "Computational study of bio- and nano-systems: chemical, spectroscopic and conformational aspects"	PI progetto parte italiana. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Fondi per missioni di scambio.
dal 21/07/2014 al 31/12/2016	Scuola Normale Superiore – Progetti Interni "Lights on Membrane: A Theoretical and Spectroscopic Investigation of Lipid Diffusion and Self-Organization"	PI del progetto. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Costo: 54K euro.
dal 08/03/2014 al 08/03/2017	MIUR - PRIN 2012 "Metodologie chimiche innovative per strategie molecolari avanzate in biomedicina" – PI prof. Claudio Luchinat	Responsabile unità di ricerca. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Costo: 195K euro.
Dal 2012 al 2017	Istituto Nazionale di Fisica Nucleare – Iniziativa Specifica Nazionale "Biophys" – 9 nodi italiani	Partecipante ad unità di ricerca presso Scuola Normale Superiore. Tempo di calcolo e fondi per missioni.
Dal 2017 ad oggi (rinnovato ogni 3 anni)	Istituto Nazionale di Fisica Nucleare – Iniziativa Specifica "Biophys"	Responsabile unità di ricerca presso Scuola Normale Superiore. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Tempo di calcolo e fondi per missioni.
dal 15/06/2016 al 31/12/2018	Scuola Normale Superiore – Progetti Interni "Self-Propelled Molecular Machines in Solution and Lipid Bilayers: A Combined Theoretical and Experimental Investigation"	PI del progetto. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Costo: 39K euro.
dal 12/04/2016 al 11/10/2018	Regione Toscana FAS SALUTE 2014 "DIAMANTE: Diagnostica molecolare innovativa per la scelta terapeutica personalizzata dell'adenocarcinoma duttale pancreatico" PI prof. Ugo Boggi	Responsabile unità di ricerca. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Costo: 106K euro.
dal 28/06/2017 al 28/06/2018	HPC Cineca – Progetto ISCRA C	PI del progetto. Coordinatore delle attività di chimica computazionale del progetto. Tempo di calcolo: 200K ore.
dal 05/02/2015 al 05/02/2020	MIUR - PRIN 2015 "STARS in the CAOS (Simulation Tools for Astrochemical Reactivity and Spectroscopy in the Cyberinfrastructure for Astrochemical Organic Species)" – PI prof. Vincenzo Barone	Partecipante in unità di ricerca.
dal 06/12/2018 al 31/12/2019	UE H2020 Centre of Excellence for Computational Biomolecular Research (BioEXCEL)	Responsabile locale per Scuola Normale superiore. Fondi per organizzazione scuole e workshops.
dal 07/06/2018 al 06/06/2019	HPC Cineca – Progetto ISCRA C "MOLMOTOR: Innovative designs for the next generation of molecular motors".	Co-PI del progetto. Tempo di calcolo: 400K ore.
dal 01/12/2019 al 30/11/2021	FSE 2014-2020 – Regione Toscana COMAST "AMARTE: Sviluppo di applicazioni per la visualizzazione e consultazione interattiva attraverso dispositivi mobili delle collezioni d'arte dei	PI del progetto. Coordinatore delle attività del progetto. Costo: 54K euro.

10 Indicare la denominazione del gruppo e/o del programma di ricerca interessato, specificando se sia nazionale o internazionale, l'eventuale ente finanziatore pubblico/privato e l'eventuale bando competitivo in base al quale il programma sia stato finanziato, e ogni altro elemento utile.

11 Indicare in modo circostanziato gli elementi utili alla valutazione quali il ruolo di organizzazione, direzione, coordinamento, partecipazione che si ha all'interno del gruppo/programma di ricerca indicato (es. PI-principal investigator o responsabile di unità locale ecc.) e le attività svolte.

**II.1bis – Elenco dei collaboratori (post-dottorandi, assegnisti di ricerca) supervisionati nell’ambito della propria attività di ricerca scientifica**

Nome	Ruolo ricoperto e breve descrizione dell’attività <sup>12</sup>
Enrico Benassi	Assegnista di ricerca, chimico computazionale
Balasubramanian Chandramouli	Assegnista di ricerca, chimico computazionale
Nuno Barbosa	Assegnista di ricerca, chimico computazionale
Luciano Carta	Assegnista di ricerca, chimico computazionale
Tommaso D’Agostino	Assegnista di ricerca, chimico computazionale
Nicholous Bhattacharjee	Assegnista di ricerca, chimico computazionale
Andrea Catte	Assegnista di ricerca, chimico computazionale
Sourab Sinha	Assegnista di ricerca, chimico computazionale

**II.2 - Direzione di istituti culturali e di ricerca, o di articolazioni interne degli stessi**

Periodo di svolgimento (data inizio e data fine attività)	Istituto culturale e di ricerca o sua articolazione interna	Breve descrizione dell’attività di direzione svolta <sup>13</sup>
dal _____ al _____		
Ecc.		

**II.3 - Direzione di riviste, collane editoriali, encyclopedie o partecipazione a comitati editoriali degli stessi**

Periodo di svolgimento (data inizio e data fine attività)	Titolo della rivista/collana editoriale, encyclopedie	Breve descrizione dell’attività svolta <sup>14</sup>
dal 2/7/2021 al oggi	Biomolecules - MDPI	Editorial board member della rivista, col ruolo di revisionare articoli e curator di collane editoriali

**II.4 - Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca:**

Data/anno di conseguimento	Titolo/denominazione del premio o riconoscimento (specificando se nazionale o internazionale)	Ente/Istituzione conferente il premio e Stato
/ /	Es. Premio internazionale “ _____ ”	

**II.5 – Partecipazione in qualità di relatore<sup>15</sup> a congressi e convegni nazionali e internazionali e/o partecipazione all’organizzazione degli stessi:**

Giorno/i di svolgimento del congresso/convegno	Ente organizzatore e sede di svolgimento	Titolo del congresso/convegno (specificando se nazionale o internazionale)	Titolo dell’intervento <u>come</u> <u>relatore</u> (specificando se su invito) oppure Breve descrizione della partecipazione all’organizzazione
Date 20-24 / 09 / 2010	Società Italiana di Chimica Fisica, sede Stresa	XXXIX Congresso Nazionale di Chimica Fisica	Relatore: Structural and Vibrational analysis of XAFS spectroscopy by ab-initio molecular dynamics: Zn <sup>2+</sup> in aqueous solution MENZIANI

12 Indicare in modo circostanziato gli elementi utili alla valutazione quali il ruolo di organizzazione, direzione, coordinamento, parte del gruppo/programma di ricerca indicato (es. PI-principal investigator o responsabile di unità locale ecc.) e le attività svolte.

13 Indicare in modo sufficientemente circostanziato gli elementi utili alla valutazione specificando l’attività svolta di direzione svolta

14 Indicare in modo sufficientemente circostanziato gli elementi utili alla valutazione specificando l’attività svolta di direzione editoriali.

15 Si fa qui riferimento esclusivamente ad interventi effettuati come relatore in congressi/convegni (non partecipazioni con poster, come semplice autore ecc.)

Date 11-16 / 09 / 2011	Società Italiana di Chimica, sede Lecce	XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana	Relatore su invito: Time-dependent Modeling of Complex Systems in the Soft Condensed Matter
Date 11-13 / 06 / 2012	CECAM e SNS, sede Scuola Normale Superiore, Pisa	Workshop internazionale CECAM Flagship "DNA sequencing and detection with nanoprobe"	Membro del scientific organizing committee
Date 15-17 / 10 / 2013	CECAM, SNS e Forschungszentrum Jülich, sede Jülich, Germania	Workshop internazionale CECAM Flagship "Frontiers of computational biomolecular spectroscopy and mass spectrometry"	Membro del scientific organizing committee
Date 15-17 / 10 / 2013	CECAM, SNS e Forschungszentrum Jülich, sede Jülich, Germania	Workshop internazionale CECAM Flagship "Frontiers of computational biomolecular spectroscopy and mass spectrometry"	Relatore su invito: Designing Optical Biosensors Based on Unusual Photophysical Properties
Date 02-06 / 09 / 2013	European Society for Photobiology, Liège (Belgium)	European Society for Photobiology 2013 Congress	Relatore su invito: The role of theory in designing optical biosensors based on unusual photophysical properties
Date 1-2 / 12 / 2014	SNS, sede Scuola Normale Superiore, Pisa	Workshop nazionale "Winter Modeling 2014"	Membro del scientific organizing committee
Date 23-25 / 05 / 2016	CECAM e SNS e Forschungszentrum Jülich, sede Scuola Normale Superiore, Pisa	Workshop internazionale CECAM Flagship "Structural and Functional Annotation of Bioinorganic Systems: Perspectives and Challenges from Theory and Experiments"	Membro del scientific organizing committee
Date 18-21 / 09 / 2016	Società Italiana Biofisica Pura e Applicata, sede Palazzo di Cortona, Cortona	XXIII Congresso Nazionale SIBPA	Relatore su invito: Ferritin as a Model Nanoscale Cage: a Combined Functional and Computational Study
Date 26-28 / 09 / 2016	INFN Bari, sede Bari	INFN Meeting 2016 Biophys & Pieces	Relatore su invito: Computer-Aided Protein Engineering: Hemolysin and Ferritin as Test Cases
Date 25-26 / 09 / 2017	SNS, sede Scuola Normale Superiore, Pisa	Workshop nazionale INFN BIOPHYS & PLEXNET	Membro del scientific organizing committee
Date 3-4 / 04 / 2017	Bioexcel e Università di Cagliari, sede Cagliari, Italia	First Workshop on "Hybrid Methods in Molecular Simulation"	Relatore su invito: A QM/MM Approach for Simulating Non-Periodic Molecular Systems in the Liquid Phase
Date 21-23 / 05 / 2018	CECAM e SNS e Forschungszentrum Jülich, sede Scuola Normale Superiore, Pisa	Workshop internazionale CECAM Flagship "Physiological role of ions in the brain: towards a comprehensive view by molecular simulation"	Membro del scientific organizing committee
Date 10-12 / 09 / 2018	INFN Bologna, sede Arcidosso Grosseto, Italia	Workshop nazionale INFN BIOPHYS & PLEXNET	Membro del scientific organizing committee
Date 10-12 / 09 / 2018	INFN Bologna, sede Arcidosso Grosseto, Italia	Workshop nazionale INFN BIOPHYS & PLEXNET	Relatore su invito: Modeling inherited and de novo mutations in a voltage-gated potassium channel
Date 23 / 01 / 2019	SNS e Università di Pavia, sede Collegio Volta, Pavia	Convegno nazionale "The IDEA of a Centre Meeting"	Relatore su invito: Unravelling the Molecular Basis of Inherited Channelopathies in a Voltage-Gated Potassium Channel
Date 23 / 01 / 2020	University of Twente sede University of Twente, The Neatherlands	Workshop internazionale Ion Channels Mini-Symposium	Relatore su invito: Understanding the effect of pathogenic mutations on the structure and function of the voltage-gated potassium channel Kv4.3
Date 27-29 / 09 / 2021	CECAM e SNS e Forschungszentrum Jülich, sede Scuola Normale Superiore, Pisa	Workshop internazionale CECAM Flagship "Innovative strategies for neurodegenerative diseases: perspective from molecular simulation, machine learning and experiment"	Membro del scientific organizing committee
Date 16-18 / 03 / 2022	CECAM e SNS e Forschungszentrum Jülich, sede Scuola Normale Superiore, Pisa	Workshop internazionale CECAM Flagship "Recent Advances in Machine Learning Accelerated Molecular Dynamics"	Membro del scientific organizing committee
Date 24-26 / 10 / 2022	CECAM e SNS e Forschungszentrum	Workshop internazionale CECAM Flagship "Ions, membrane and	Membro del scientific organizing committee

	Jülich e Temple University, sede Temple University, Roma	channels: Multiscale simulations from quantum to coarse-grain”	
--	--	--	--

**II.6 – Attività di ricerca svolta sulla base di rapporti contrattuali o comunque formalizzati presso istituzioni di alta cultura, università, accademie ed enti di ricerca, pubblici e privati, italiani o stranieri, di alta qualificazione a livello nazionale e internazionale:**

Periodo svolgim. attività di ricerca (data inizio e data fine attività)	Istituzione alta cultura, Università, Accademia, Ente di ricerca	Tipologia di contratto	Breve descrizione dell’attività svolta <sup>16</sup>
dal 01/11/1999 al 07/02/2003	Università di Roma “La Sapienza”	Borsa di dottorato	Attività di ricerca di chimica e biologia computazionale nel gruppo del prof. Alfredo Di Nola
dal 01/11/2002 al 31/12/2003	New York University, New York, USA	Borsa postdoc	Attività di ricerca di chimica e biologia computazionale nel gruppo del prof. Mark Tuckerman
dal 01/02/2004 al 31/5/2004	Università di Padova	Assegno di ricerca	Attività di ricerca di chimica computazionale nel gruppo del prof. Vincenzo Barone
dal 01/06/2004 al 30/5/2005	Centro Regionale di Competenza Campania, Università Federico II Napoli	Borsa postdoc	Attività di ricerca di chimica computazionale nel gruppo del prof. Vincenzo Barone
dal 22/05/2006 al 30/9/2006	Centro Regionale di Competenza Campania, Università Federico II Napoli	Borsa postdoc	Attività di ricerca di chimica computazionale nel gruppo del prof. Vincenzo Barone
dal 01/10/2006 al 30/9/2008	Università Federico II Napoli	Assegno di ricerca	Attività di ricerca di chimica computazionale nel gruppo del prof. Vincenzo Barone
dal 01/10/2008 al 30/09/2009	Università di Napoli Federico II – Dipartimento di Farmacia	Borsa postdoc	Attività di ricerca di chimica farmaceutica computazionale nel gruppo del prof. Ettore Novellino
dal 16/11/2009 al 30/09/2011	Istituto Italiano di Tecnologia	Senior Postdoc	Attività di ricerca di chimica e biologia computazionale nel gruppo del prof. Vincenzo Barone

**II.7 – Risultati ottenuti nel trasferimento tecnologico in termini di partecipazione alla creazione di spin off partecipati e non, conseguimento della titolarità di brevetti o impiego degli stessi, nei settori in cui è rilevante:**

Titolo brevetto	Descrizione	N° deposito	N° concessione	Nome titolare	Nome inventore	Data di deposito

Denominazione spin off (indicando se partecipati o non)	Data costituzione	Breve descrizione dell’attività svolta e dei risultati ottenuti

<sup>16</sup> Indicare in modo sufficientemente circostanziato gli elementi utili alla valutazione specificando l’oggetto dell’attività di ricerca, le eventuali finalità e i risultati raggiunti ecc.

**Parte III – PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE DI CUI SI E’ AUTORE/COAUTORE (PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA)**

(art.5, comma 4 lett. A del bando)

N.	Tipologia del prodotto scientifico (articolo, monografia, contributo in volume ecc.)	Autore/i	Titolo del prodotto (dell’articolo/contributo in volume/voce...) e riferimento (ISBN)	Titolo della rivista/volume/dizionario contenente l’articolo/contributo/voce e riferimento (ISSN-DOI-ISBN)	Anno di pubblicazione
1 -	articolo	Brancato G; Zerbetto F	<i>On the distribution of local molecular symmetry in crystals</i>	<i>J. Phys. Chem. A</i> <b>104</b> , 11439 (2000). DOI: 10.1021/jp002156r.	2000
2 -	articolo	Brancato G; Coutrot F; Leigh DA; Murphy A; Wong JK; Zerbetto F	<i>From reactants to products via simple hydrogen-bonding networks: Information transmission in chemical reactions</i>	<i>PNAS USA</i> <b>99</b> , 4967 (2002). DOI: 10.1073/pnas.072695799.	2002
3 -	articolo	Asakawa M; Brancato G; Fanti M; Leigh DA; Shimizu T; Slawin AMZ; Wong JK; Zerbetto F; Zhang SW	<i>Switching "on" and "off" the expression of chirality in peptide rotaxanes</i>	<i>J. Am. Chem. Soc.</i> <b>124</b> , 2939 (2002). DOI: 10.1021/ja015995f.	2002
4 -	articolo	Amadei A; Apol MEF; Brancato G; Di Nola A	<i>Theoretical equations of state for temperature and electromagnetic field dependence of fluid systems, based on the quasi-Gaussian entropy theory</i>	<i>J. Chem. Phys.</i> <b>116</b> , 4437 (2002). DOI: 10.1063/1.1448291.	2002
5 -	articolo	D’Alessandro M; D’Abramo M; Brancato G; Di Nola A; Amadei A	<i>Statistical mechanics and thermodynamics of simulated ionic solutions</i>	<i>J. Phys. Chem. B</i> <b>106 (45)</b> , 11843 (2002). DOI: 10.1021/jp021428i.	2002
6 -	articolo	Cicero DO; Melino S; Orsale M; Brancato G; Amadei A; Forlani F; Pagani S; Paci M	<i>Structural rearrangements of the two domains of Azotobacter vinelandii rhodanese upon sulfane sulfur release: essential molecular dynamics, N-15 NMR relaxation and deuterium exchange on the uniformly labeled protein</i>	<i>Int. J. Biol. Macromol.</i> <b>33</b> , 193 (2003). DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2003.08.010.	2003
7 -	articolo	Brancato G; Di Nola A; Barone V; Amadei A	<i>A mean field approach for molecular simulations of fluid systems</i>	<i>J. Chem. Phys.</i> , <b>122</b> , 154109 (2005). DOI: 10.1063/1.1877172.	2005
8 -	articolo	Brancato G; Tuckerman ME	<i>A polarizable multistate empirical valence bond model for proton transport in aqueous solution</i>	<i>J. Chem. Phys.</i> , <b>122</b> , 224507 (2005). DOI: 10.1063/1.1902924.	2005
9 -	articolo	Brancato G; Rega N; Barone V	<i>A quantum mechanical/molecular dynamics/mean field study of acrolein in aqueous solution: Analysis of H bonding and bulk effects on spectroscopic properties</i>	<i>J. Chem. Phys.</i> , <b>125</b> , 164515 (2006). DOI: 10.1063/1.2359723.	2006
10 -	articolo	Pavone M; Brancato G; Morelli G; Barone V	<i>Spectroscopic properties in the liquid phase: Combining high-level ab initio calculations and classical molecular dynamics</i>	<i>ChemPhysChem</i> , <b>7</b> , 148 (2006). DOI: 10.1002/cphc.200500357.	2006
11 -	articolo	Brancato G; Rega N; Barone V	<i>Reliable molecular simulations of solute-solvent systems with a minimum number of solvent shells</i>	<i>J. Chem. Phys.</i> , <b>124</b> , 214505 (2006). DOI: 10.1063/1.2202356.	2006
12 -	articolo	Rega N; Brancato G; Barone V	<i>Non-periodic boundary conditions for ab initio</i>	<i>Chem. Phys. Lett.</i> , <b>422</b> , 367 (2006). DOI:	

			<i>molecular dynamics in condensed phase using localized basis functions</i>	<i>10.1016/j.cplett.2006.02.051.</i>	
13 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Rega N; Barone V</i>	<i>Unraveling the Role of Stereo-electronic, Dynamical, and Environmental Effects in Tuning the Structure and Magnetic Properties of Glycine Radical in Aqueous Solution at Different pH Values</i>	<i>J. Am. Chem. Soc., 129, 15380 (2007). DOI: 10.1021/ja074910t.</i>	2007
14 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Barone V; Rega N</i>	<i>Theoretical modeling of spectroscopic properties of molecules in solution: toward an effective dynamical discrete/continuum approach</i>	<i>Theor. Chem. Acc., 117, 1001 (2007). DOI: 10.1007/s00214-006-0216-z.</i>	2007
15 -	<i>Capitolo in volume</i>	<i>Barone V; G. Brancato; R. Improta</i>	<i>Toward an integrated computational approach for the description of localized physico-chemical properties involving biomolecules</i>	<i>Chapter in Computational Proteomics 2008, Ed. Maria J. Ramos, Transworld Research Network, (2008).</i>	2008
16 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Rega N; Barone V</i>	<i>A discrete/continuum QM/MM MD study of the triplet state of acetone in aqueous solution</i>	<i>Chem. Phys. Lett., 453, 202 (2008). DOI: 10.1016/j.cplett.2008.01.045.</i>	2008
17 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Rega N; Barone V</i>	<i>A hybrid explicit/implicit solvation method for first-principle molecular dynamics simulations</i>	<i>J. Chem. Phys. 128, 144501 (2008). DOI: 10.1063/1.2897759.</i>	2008
18 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Rega N; Barone V</i>	<i>Accurate density functional calculations of near-edge X-ray and optical absorption spectra of liquid water using nonperiodic boundary conditions: The role of self-interaction and long-range effects</i>	<i>Phys. Rev. Lett. 100, 107401 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.107401.</i>	2008
19 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Rega N; Causà M; Barone V</i>	<i>Theoretical modeling of open-shell molecules in solution: a QM/MM molecular dynamics approach</i>	<i>Theor. Chem. Acc. 120, 499 (2008). DOI: 10.1007/s00214-008-0445-4.</i>	2008
20 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Rega N; Barone V</i>	<i>Microsolvation of the Zn(II) ion in aqueous solution: A hybrid QM/MM MD approach using non-periodic boundary conditions</i>	<i>Chem. Phys. Lett. 451, 53 (2008). DOI: 10.1016/j.cplett.2007.11.100.</i>	2008
21 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G.; N. Rega; Barone V</i>	<i>Molecular dynamics simulations in a NpT ensemble using non-periodic boundary conditions</i>	<i>Chem. Phys. Lett. 483, 177-181 (2009). DOI: 10.1016/j.cplett.2009.10.069.</i>	2009
22 -	<i>articolo</i>	<i>Dalla Via L., Marciani Magno S., Gia O., Maria Marini A., Da Settimo F.; Salerno S., La Motta C., Simorini F., Taliani S., Lavecchia A., Di Giovanni C.; Brancato G.; Barone V.; Novellino E.</i>	<i>Benzothiopyranoindole-Based Antiproliferative Agents: Synthesis, Cytotoxicity, Nucleic Acids Interaction, and Topoisomerases Inhibition Properties</i>	<i>J. Med. Chem. 52, 5429-5441 (2009). DOI: 10.1021/jm900627v.</i>	2009
23 -	<i>articolo</i>	<i>Barone V; M. Biczysko; G. Brancato</i>	<i>Extending the Range of Computational Spectroscopy by QM/MM Approaches. Time-dependent and Time-independent routes</i>	<i>Advances in Quantum Chemistry, Volume 59, 17-57 (2010). DOI: 10.1016/S0651-3276(10)59002-6.</i>	2010
24 -	<i>articolo</i>	<i>Brancato G; Rega N; Barone V</i>	<i>Uracil anion radical in aqueous solution: Thermodynamics versus</i>	<i>Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 10736-10739 (2010). DOI: 10.1039/c0030</i>	

			<i>Spectroscopy</i>		
25 -	articolo	Brancato G; Rega N; Barone V	<i>Microsolvation of uracil anion radical in aqueous solution: a QM/MM study</i>	<i>Chem. Phys. Lett.</i> <b>500</b> , 104-110 (2010). DOI: 10.1016/j.cplett.2010.09.078.	2010
26 -	articolo	Rega N; Brancato G; Petrone A; Caruso P; Barone V	<i>Vibrational analysis of x-ray absorption fine structure thermal factors by ab initio molecular dynamics: The Zn(II) ion in aqueous solution as a case study</i>	<i>J. Chem. Phys.</i> <b>134</b> , 074504 (2011). DOI: 10.1063/1.3549827.	2011
27 -	articolo	Brancato G; Barone V	<i>Free Energy Landscapes of Ion Coordination in Aqueous Solution</i>	<i>J. Phys. Chem. B</i> <b>115</b> , 12875-12878 (2011). DOI: 10.1021/jp207018j.	2011
28 -	Capitolo in volume	Brancato G; Rega N	<i>Computational spectroscopy by classical time-dependent approaches</i>	<i>Chapter in COMPUTATIONAL STRATEGIES FOR SPECTROSCOPY: From Small Molecules To Nano Systems</i> , pp. 517-547, editor V. Barone, Wiley and Sons, New York (2011). DOI: 10.1002/9781118008720.ch11. ISBN: 978-1-118-00872-0.	2011
29 -	articolo	M. Biczysko; J. Bloino; G. Brancato; I. Cacelli; Cappelli C; A. Ferretti; A. Lami; S. Monti; A. Pedone; G. Prampolini; C. Puzzarini; F. Santoro; F. Trani; G. Villani	<i>Integrated computational approaches for spectroscopic studies of molecular systems in the gas phase and in solution: Pyrimidine as a test case</i>	<i>Theo. Chem. Acc.</i> <b>131</b> , 1-19, (2012). DOI: 10.1007/s00214-012-1201-3.	2012
30 -	articolo	Zazza C; G. Mancini; G. Brancato; N. Sanna; Barone V	<i>Neutral molecular shuttle in acetonitrile dilute solution: new insights from molecular dynamics and density functional theory</i>	<i>Computational and Theoretical Chemistry</i> <b>985</b> , 53-61 (2012). DOI: 10.1016/j.comptc.2012.01.039.	2012
31 -	articolo	Grubisic S; Brancato G; Pedone A; Barone V	<i>Extension of the AMBER force field to cyclic alpha,alpha dialkylated peptides</i>	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> <b>14</b> , 15308 (2012). DOI: 10.1039/c2cp42713c.	2012
32 -	articolo	Costantino Zazza; Giordano Mancini; Giuseppe Brancato; Vincenzo Barone	<i>In Silico Study of Molecular-Engineered Nanodevices: A Lockable Light-Driven Motor in Dichloromethane Solution</i>	<i>J. Phys. Chem. Lett.</i> , <b>1</b> , 3885 (2013). DOI: 10.1021/jz4019404.	2013
33 -	articolo	Matthias Koenig; Giovanni Bottari; Giuseppe Brancato; Vincenzo Barone; Dirk M. Guldin; Tomás Torres	<i>Unraveling the peculiar modus operandi of a new class of solvatochromic fluorescent molecular rotors by spectroscopic and quantum mechanical methods</i>	<i>Chem. Sci.</i> <b>4</b> , 2502 (2013). DOI: 10.1039/c3sc50290b.	2013
34 -	articolo	Sonja Grubišić; Giuseppe Brancato; Vincenzo Barone	<i>An improved AMBER force field for <math>\alpha,\alpha</math>-dialkylated peptides: intrinsic and solvent-induced conformational preferences of model systems</i>	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> <b>15</b> , 17395 (2013). DOI: 10.1039/c3cp52721b.	2013
35 -	articolo	Laura Hermosilla; Giacomo Prampolini; Paloma Calle; José Manuel García de la Vega; Giuseppe Brancato; Vincenzo Barone	<i>Extension of the AMBER Force Field for Nitroxide Radicals and Combined QM/MM/PCM Approach to the Accurate Determination of EPR Parameters of DMPO-H in Solution</i>	<i>J. Chem. Theory Comput.</i> <b>9</b> , 3626-36 (2013). DOI: 10.1021/ct4003256.	2013
36 -	articolo	Barone V. and Brancato G.	<i>Premio Nobel 2013 Per la Chimica. Le Scienze Molecolari tra Reale e Virtuale</i>	<i>La Chimica e L'Industria</i> <b>8</b> , 84-86 (2013). ISSN: 0009-4315.	

37 -	articolo	Giordano Mancini; Giuseppe Brancato; Vincenzo Barone	Combining the Fluctuating Charge Method, Non-periodic Boundary Conditions and Metadynamics: Aqua Ions as Case Studies	<i>J. Chem. Theory Comput.</i> <b>10</b> , 1150–63 (2014). DOI: 10.1021/ct400988e.	2014
38 -	articolo	Minei, Pierpaolo; Koenig, Matthias; Battisti, Antonella; Ahmad, Muzaffer; Barone, Vincenzo; Torres, Tomas; Guldi, Dirk M.; Brancato, Giuseppe; Bottari, Giovanni; Pucci, Andrea	Reversible vapochromic response of polymer films doped with a highly emissive molecular rotor	<i>J. Mat. Chem. C</i> <b>2</b> , 9224–32 (2014). DOI: 10.1039/C4TC01737D.	2014
39 -	articolo	Koenig, Matthias; Torres, Tomás; Barone, Vincenzo; Brancato, Giuseppe; Guldi, Dirk M; Bottari, Giovanni	Ultrasound-induced transformation of fluorescent organic nanoparticles from a molecular rotor into rhomboidal nanocrystals with enhanced emission	<i>Chem. Comm.</i> <b>50</b> , 12955–58 (2014). DOI: 10.1039/c4cc05531d.	2014
40 -	articolo	Mancini, Giordano; Brancato, Giuseppe; Chandramouli, Balasubramanian; Barone, Vincenzo	Organic solvent simulations under non-periodic boundary conditions: A library of effective potentials for the GLOB model	<i>Chem. Phys. Lett.</i> <b>625</b> , 186–192 (2015). DOI: 10.1016/j.cplett.2015.03.001.	2015
41 -	articolo	Chandramouli, Balasubramanian; Di Maio, Danilo; Mancini, Giordano; Barone, Vincenzo; Brancato, Giuseppe	Breaking the Hydrophobicity of the MscL Pore: Insights into a Charge-Induced Gating Mechanism	<i>PLoS One</i> <b>10</b> , e0120196 (2015). DOI: 10.1371/journal.pone.0120196.	2015
42 -	articolo	Chandramouli, Balasubramanian; Zazza, Costantino; Mancini, Giordano; Brancato, Giuseppe	Boundary condition effects on the dynamic and electric properties of hydration layers	<i>J. Phys. Chem. A</i> <b>119</b> , 5465–75 (2015). DOI: 10.1021/jp511824t.	2015
43 -	articolo	Di Maio, Danilo; Chandramouli, Balasubramanian; Brancato, Giuseppe	Pathways and Barriers for Ion Translocation through the 5-HT3A Receptor Channel	<i>PLoS One</i> <b>10</b> , e0140258 (2015). DOI: 10.1371/journal.pone.0140258.	2015
44 -	articolo	Brancato, Giuseppe; Signore, Giovanni; Neyroz, Paolo; Pollini, Dario; Cerullo, Giulio; Abbandonato, Gerardo; Nucara, Luca; Barone, Vincenzo; Beltram, Fabio; Bizzarri, Ranieri	Dual fluorescence through Kasha's rule breaking: an unconventional photomechanism for intracellular probe design	<i>J. Phys. Chem. B</i> <b>119</b> , 6144–54 (2015). DOI: 10.1021/acs.jpcb.5b01119	2015
45 -	articolo	Koenig, Matthias; Storti, Barbara; Bizzarri, Ranieri; Guldi, Dirk M.; Brancato, Giuseppe; Bottari, Giovanni	A fluorescent molecular rotor showing vapochromism, aggregation-induced emission, and environmental sensing in living cells	<i>J. Mat. Chem. C</i> <b>4</b> , 3018–3027 (2016). DOI: 10.1039/C5TC03541D.	2016
46 -	articolo	Chandramouli, Balasubramanian; Bernacchioni, Caterina; Di Maio, Danilo; Turano, Paola; Brancato, Giuseppe	Electrostatic and Structural Bases of Fe <sup>2+</sup> Translocation through Ferritin Channels	<i>J. Bio. Chem.</i> <b>291</b> , 25617–28 (2016). DOI: 10.1074/jbc.M116.748046	2016
47 -	articolo	Minei, Pierpaolo; Ahmad, Muzaffer; Barone, Vincenzo; Brancato, Giuseppe; Passaglia, Elisa; Bottari, Giovanni; Pucci, Andrea	Vapochromic behavior of polycarbonate films doped with a luminescent molecular rotor	<i>Polymers for Advanced Technologies</i> <b>27</b> , 429–35 (2016). DOI: 10.1002/pat.3688.	2016
48 -	articolo	Grubišić, Sonja; Chandramouli, Balasubramanian; Barone, Vincenzo; Brancato, Giuseppe	Chain length, temperature and solvent effects on the structural properties of $\alpha$ -aminoisobutyric acid homooligopeptides	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> <b>18</b> , 20389–98 (2016). DOI: 10.1039/c6cp01120a.	2016
49 -	articolo	Dreyer, Jens; Brancato, Giuseppe; Ippoliti, Emiliano;	First Principles Methods in Biology: From Continuum	<i>Chapter in Simulating Enzyme Reactivity:</i>	

		Genna, Vito; De Vivo, Marco; Carloni, Paolo; Rothlisberger, Ursula	Models to Hybrid Ab initio Quantum Mechanics/Molecular Mechanics	Computational Methods in Enzyme Catalysis, pp. 294-339, from the Series Theoretical and computational chemistry series, editors: Inaki Tunon, Vicent Moliner, The Royal Society of Chemistry (2016). DOI: 10.1039/9781782626831-00294.	
50 -	articolo	Chandramouli, Balasubramanian; Di Maio, Danilo; Mancini, Giordano; Brancato, Giuseppe	Introducing an artificial photo-switch into a biological pore: A model study of an engineered $\alpha$ -hemolysin	Biochim. Biophys. Acta Biomembr. 1858, 689-697 (2016). DOI: 10.1016/j.bbamem.2015.12.030.	2016
51 -	articolo	Di Maio, Danilo; Chandramouli, Balasubramanian; Yan, Robert; Brancato, Giuseppe; Pastore, Annalisa	Understanding the role of dynamics in the iron sulfur cluster molecular machine	Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects 1861, 3154-63 (2017). DOI: 10.1016/j.bbagen.2016.07.020.	2017
52 -	articolo	Ahmad, Muzaffer; Platonova, Irina; Battisti, Antonella; Minei, Pierpaolo; Brancato, Giuseppe; Pucci, Andrea	Highly selective vapochromic fluorescence of polycarbonate films Doped with an ICT-Based solvatochromic probe	Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics, 55(15), 1171-1180 (2017). DOI: 10.1002/polb.24367.	2017
53 -	articolo	Macchiagodena, Marina; Del Frate, Gianluca; Brancato, Giuseppe; Chandramouli, Balasubramanian; Mancini, Giordano; Barone, Vincenzo	Computational study of the DPAP molecular rotor in various environments: From force field development to molecular dynamics simulations and spectroscopic calculations	Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 30590-30602 (2017). DOI: 10.1039/c7cp04688j.	2017
54 -	articolo	Akhunzada, M. J.; Chandramouli, Balasubramanian; Bhattacharjee, Nicholus; Macchi, Sara; Cardarelli, Francesco; Brancato, Giuseppe	The role of Tat peptide self-aggregation in membrane pore stabilization: insights from a computational study	Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 27603-27610 (2017). DOI: 10.1039/c7cp05103d.	2017
55 -	articolo	Gama, Sofia; Frontauria, Mariachiara; Ueberschaar, Nico; Brancato, Giuseppe; Milea, Demetrio; Sammartano, Silvio; Plass, Winfried	Thermodynamic study on 8-hydroxyquinoline-2-carboxylic acid as a chelating agent for iron found in the gut of Noctuid larvae	New Journal of Chemistry, 42(10), 8062-8073 (2018). DOI: 10.1039/c7nj04889k.	2018
56 -	articolo	Akhunzada, Jan Muhammad; D'Autilia, Francesca; Chandramouli, Balasubramanian; Bhattacharjee, Nicholus; Catte, Andrea; Di Rienzo, Roberto; Cardarelli, Francesco; Brancato, Giuseppe	Interplay between lipid lateral diffusion, dye concentration and membrane permeability unveiled by a combined spectroscopic and computational study of a model lipid bilayer	Scientific Reports 9, 1508 (2019). DOI: 10.1038/s41598-018-37814-x.	2019
57 -	articolo	Akhunzada, M. J.; Sagresti, L.; Catte, A.; Bhattacharjee, N.; D'Agostino, T.; Brancato, G.	Temperature Dependence of the Structure and Dynamics of a Dye-Labeled Lipid in a Planar Phospholipid Bilayer: A Computational Study	The Journal of Membrane Biology, 252(4), 227-240 (2019). DOI: 10.1007/s00232-019-00081-6.	2019
58 -	articolo	Catte, A.; Ferbel, L.; Bhattacharjee, N.; Jan Akhunzada, M.; D'Agostino, T.; Brancato, G.	In silico investigation of the interaction between the voltage-gated potassium channel Kv4.3 and its auxiliary protein KChIP1	Phys. Chem. Chem. Phys., 21, 25290-25301 (2019). DOI: 10.1039/C9CP04082J.	2019
59 -	articolo	Miletić, Tanja; Biot, Nicolas; Demitri, Nicola; Brancato,	Leveraging Fluorescent Emission to Unitary Yield:	Helvetica Chimica Acta 102(3), e1900004 (2019).	

		Giuseppe; Kariuki, Benson M.; Bonifazi, Davide	Dimerization of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons	DOI: 10.1002/hlca.201900004.	
60 -	articolo	Arena, K.; Brancato, G.; Cacciola, F.; Crea, F.; Cataldo, S.; De Stefano, C.; Gama, S.; Lando, G.; Milea, D.; Mondello, L.; Pettignano, A.; Plass, W.; Sammartano, S.	8-hydroxyquinoline-2-carboxylic acid as possible molybphophore: A multi-technique approach to define its chemical speciation, coordination and sequestering ability in aqueous solution	Biomolecules, 10(6), 930 (2020). DOI: 10.3390/biom10060930.	2020
61 -	articolo	Lavarda, G.; Bhattacharjee, N.; Brancato, G.; Torres, T.; Bottari, G.	Enabling Racemization of Axially Chiral Subphthalocyanine-Tetracyanobutadiene-Aniline Enantiomers by Triplet State Photogeneration	Angewandte Chemie International Edition 59, 21224–21229 (2020). DOI: 10.1002/anie.202010133.	2020
62 -	articolo	Mateo L. M.; Sagresti L.; Luo Y.; Guldin D. M.; Torres T.; Brancato G.; Bottari G.	Expanding the Chemical Space of Tetracyanobuta-1,3-Diene (TCBD) through a Cyano-Diels-Alder Reaction: Synthesis, Structure, and Physicochemical Properties of an Anthryl-Fused-TCBD Derivative	Chemistry – A European Journal 27, 16049–55 (2021). DOI: 10.1002/chem.202103079.	2021
63 -	articolo	Barbosa N.; Sagresti L.; Brancato G.	Photoinduced Azobenzene-Modified DNA Dehybridization: Insights into Local and Cooperativity Effects from a Molecular Dynamics Study	Physical Chemistry Chemical Physics 23, 25170–79 (2021). DOI: 10.1039/DICP04032D.	2021
64 -	articolo	Barbosa N.; Pagliai M.; Sinha S.; Barone V.; Alfè D.; Brancato G.	Enhancing the Accuracy of Ab Initio Molecular Dynamics by Fine Tuning of Effective Two-Body Interactions: Acetonitrile as a Test Case	The Journal of Physical Chemistry A (2021). Accepted. DOI: 10.1021/acs.jpca.1c07576	2021
65 -	articolo	Del Frate G.; Macchiagodena M.; Akhunzada M. J.; D'Autilia F.; Catte A.; Bhattacharjee N.; Barone V.; Cardarelli F.; Brancato G.	Probing liquid-ordered and disordered phases in lipid model membranes: a combined theoretical and spectroscopic study of a fluorescent molecular rotor	The Journal of Physical Chemistry B (2021). Under review.	2021
66 -	articolo	Ferretti A.; Sourab S.; Sagresti L.; Araya-Hermosilla E.; Prato M.; Mattoli V.; Pucci A.; Brancato G.	One-step Functionalization of Mildly and Strongly Reduced Graphene Oxide with Maleimide: An Experimental and Theoretical Investigation of the Diels-Alder [4+2] Cycloaddition Reaction	Physical Chemistry Chemical Physics (2021). Under review.	2021
67 -	articolo	Catte A.; Tiecher C.; Bhattacharjee N.; Brancato G.; Kocer A.	Unravelling the molecular origin of an inherited channelopathy in the voltage-gated potassium channel Kv4.3	Submitted.	2021

#### Parte IV – ATTIVITÀ ACCADEMICO-ISTITUZIONALI DI RESPONSABILITÀ, DI SERVIZIO E/O DI TERZA MISSIONE

(art.5, comma 5 del bando)

#### IV.1 - Cariche o incarichi accademici-istituzionali di responsabilità e/o di servizio formalmente conferiti dagli organi accademici

Carica o incarico accademico-istituzionale ricoperto	Periodo di svolgimento	Estremi atto formale di conferimento
Incarico di delegato per la Scuola Normale Superiore al Consiglio	dal 10/11/2016 ad oggi	Decreto direttoriale n. 619 del 10/11/2016 della Scuola Normale Superiore

<i>Direttivo del Consorzio interuniversitario per lo sviluppo dei Sistemi a Grande Interfase</i>		
<i>Incarico di delegato per la Scuola Normale Superiore al Consiglio Direttivo del Consorzio Interuniversitario per le Applicazioni di Supercalcolo per Università e Ricerca</i>	<i>dal 28/05/2012 al 19/07/2013</i>	<i>Decreto direttoriale n. ??? del 28/05/2012 della Scuola Normale Superiore</i>

**IV.2 - Partecipazioni in qualità di componente a Commissioni/Comitati o altri organi a carattere collegiale di ateneo o di struttura accademica previsti da Regolamenti accademici per realizzare finalità di carattere istituzionale, organizzativo, gestionale e di servizio, quali il Comitato Unico di Garanzia, le Commissioni paritetiche, il Collegio dei docenti di corsi Ph.D., le Commissioni elettorali ecc.**

<b>Commissione/Comitato/organo a carattere collegiale (specificando se di Ateneo o di struttura accademica)</b>	<b>Periodo di partecipazione</b>	<b>Statuto/Regolamento accademico di riferimento</b>
<i>Componente del Collegio dei Docenti del corso di PhD in Chimica</i>	<i>dal 1/11/2013 al 31/10/2014</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente del Collegio dei Docenti del corso di PhD in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari</i>	<i>dal 1/11/2014 al 31/10/2017</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente del Collegio dei Docenti del corso di PhD in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari</i>	<i>dal 1/11/2019 al 31/10/2022</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente del Collegio dei Docenti del corso di PhD in Nanoscienze</i>	<i>dal 1/11/2017 al 31/10/2022</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente del Collegio dei Docenti del corso di PhD in Astrochimica</i>	<i>dal 1/11/2019 al 31/10/2021</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente del Collegio dei Docenti del corso di PhD in Data Science</i>	<i>dal 1/11/2019 al 31/10/2021</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente della Conferenza di Ateneo</i>	<i>dal 2018 ad oggi</i>	<i>Statuto, art.34</i>
<i>Componente del Consiglio di Classe di Scienze (rappresentante ricercatori)</i>	<i>dal 2012 al 2016</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente di diritto del Consiglio di Classe di Scienze in qualità di professore aggregato</i>	<i>dal 22/03/2018 ad oggi</i>	<i>Statuto, art.30</i>
<i>Componente del Collegio Accademico (rappresentante ricercatori)</i>	<i>dal 2016 al 2016</i>	<i>Statuto</i>
<i>Componente della Commissione Elettorale</i>	<i>dal 2016 al 2020</i>	<i>Statuto</i>
<i>Componente del Comitato Unico di Garanzia (CUG)</i>	<i>dal 2015 al 2018</i>	<i>Statuto, art.53</i>

**IV.3 - Svolgimento di attività di terza missione quali la partecipazione con interventi orali e/o assistenza nei corsi di orientamento universitari, la collaborazione didattica, organizzativa o l'intervento in programmi di divulgazione scientifica o in conferenze, dibattiti o altri eventi promossi dalla Scuola, o da altri atenei o soggetti pubblici o privati, e rivolti a un pubblico non specializzato, ecc**

<b>Evento di terza missione</b>	<b>Data o periodo di svolgimento</b>	<b>Breve descrizione attività svolta</b>
<i>Corso di formazione per i docenti delle scuole superiori presso SNS anno 2021 - Fondazione "I Lincei per la Scuola"</i>	<i>24/06/2021</i>	<i>Lezione orale di 3 ore dal titolo "Lezione di chimica per piccoli e grandi accumulatori"</i>
<i>Bright notte dei ricercatori</i>	<i>27/09/2019</i>	<i>Intervento orale dal titolo "50 Shades of Chemistry"</i>

## ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI PRESENTATE

Il sottoscritto (*cognome e nome*) Brancato Giuseppe

## PRESENTA

le seguenti pubblicazioni, nel limite massimo di 12 previsto dal Bando, ai fini della valutazione nella procedura valutativa ai sensi dell'art.24, comma 6, della Legge 240/2010 per la chiamata nel ruolo di professore associato per il settore concorsuale 03/A2 *Modelli e metodologie per le scienze chimiche* – s.s.d. CHIM/02 *Chimica Fisica*:

N.	Tipologia del prodotto scientifico (articolo, monografia, contributo in volume ecc.)	Autore/i	Titolo del prodotto (dell'articolo/contributo in volume/voce...) e riferimento (ISBN)	Titolo della rivista/volume/dizionario contenente l'articolo/contributo /voce e riferimento (ISSN-DOI-ISBN)	Anno di pubblicazione
1 -	articolo	Matthias Koenig; Giovanni Bottari; Giuseppe Brancato; Vincenzo Barone; Dirk M. Guld; Tomás Torres	<i>Unraveling the peculiar modus operandi of a new class of solvatochromic fluorescent molecular rotors by spectroscopic and quantum mechanical methods</i>	<i>Chem. Sci.</i> <b>4</b> , 2502 (2013). DOI: 10.1039/c3sc50290b.	2013
2 -	articolo	Chandramouli, Balasubramanian; Di Maio, Danilo; Mancini, Giordano; Barone, Vincenzo; Brancato, Giuseppe	<i>Breaking the Hydrophobicity of the MscL Pore: Insights into a Charge-Induced Gating Mechanism</i>	<i>PLoS One</i> <b>10</b> , e0120196 (2015). DOI: 10.1371/journal.pone.0120196.	2015
3 -	articolo	Di Maio, Danilo; Chandramouli, Balasubramanian; Brancato, Giuseppe	<i>Pathways and Barriers for Ion Translocation through the 5-HT3A Receptor Channel</i>	<i>PLoS One</i> <b>10</b> , e0140258 (2015). DOI: 10.1371/journal.pone.0140258.	2015
4 -	articolo	Brancato, Giuseppe; Signore, Giovanni; Neyroz, Paolo; Polli, Dario; Cerullo, Giulio; Abbandonato, Gerardo; Nucara, Luca; Barone, Vincenzo; Beltram, Fabio; Bizzarri, Ranieri	<i>Dual fluorescence through Kasha's rule breaking: an unconventional photomechanism for intracellular probe design</i>	<i>J. Phys. Chem. B</i> <b>119</b> , 6144-54 (2015). DOI: 10.1021/acs.jpcb.5b01119.	2015
5 -	articolo	Chandramouli, Balasubramanian; Bernacchioni, Caterina; Di Maio, Danilo; Turano, Paola; Brancato, Giuseppe	<i>Electrostatic and Structural Bases of Fe<sup>2+</sup> Translocation through Ferritin Channels</i>	<i>J. Bio. Chem.</i> <b>291</b> , 25617–28 (2016). DOI: 10.1074/jbc.M116.748046.	2016
6 -	articolo	Di Maio, Danilo; Chandramouli, Balasubramanian; Yan, Robert; Brancato, Giuseppe; Pastore, Annalisa	<i>Understanding the role of dynamics in the iron sulfur cluster molecular machine</i>	<i>Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects</i> <b>1861</b> , 3154–63 (2017). DOI: 10.1016/j.bbagen.2016.07.020.	2017
7 -	articolo	Akhunzada, M. J.; Chandramouli, Balasubramanian; Bhattacharjee, Nicholus; Macchi, Sara; Cardarelli, Francesco; Brancato, Giuseppe	<i>The role of Tat peptide self-aggregation in membrane pore stabilization: insights from a computational study</i>	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> <b>19</b> , 27603–27610 (2017). DOI: 10.1039/c7cp05103d.	2017

8 -	articolo	Akhurzada, Jan Muhammad; D'Autilia, Francesca; Chandramouli, Balasubramanian; Bhattacharjee, Nicholus; Catte, Andrea; Di Renzo, Roberto; Cardarelli, Francesco; Brancato, Giuseppe	Interplay between lipid lateral diffusion, dye concentration and membrane permeability unveiled by a combined spectroscopic and computational study of a model lipid bilayer	Scientific Reports 9, 1508 (2019). DOI: 10.1038/s41598-018-37814-x.	2019
9 -	articolo	Catte, A.; Ferbel, L.; Bhattacharjee, N.; Jan Akhurzada, M.; D'Agostino, T.; Brancato, G.	<i>In silico</i> investigation of the interaction between the voltage-gated potassium channel Kv4.3 and its auxiliary protein KChIP1	Phys. Chem. Chem. Phys., 21, 25290–25301 (2019). DOI: 10.1039/C9CP04082J.	2019
10 -	articolo	Lavarda, G.; Bhattacharjee, N.; Brancato, G.; Torres, T.; Bottari, G.	Enabling Racemization of Axially Chiral Subphthalocyanine-Tetracyanobutadiene-Aniline Enantiomers by Triplet State Photogeneration	Angewandte Chemie International Edition 59, 21224–21229 (2020). DOI: 10.1002/anie.202010133.	2020
11 -	articolo	Mateo L. M.; Sagresti L.; Luo Y.; Guldi D. M.; Torres T.; Brancato G.; Bottari G.	Expanding the Chemical Space of Tetracyanobuta-1,3-Diene (TCBD) through a Cyano-Diels-Alder Reaction: Synthesis, Structure, and Physicochemical Properties of an Anthryl-Fused-TCBD Derivative	Chemistry – A European Journal 27, 16049–55 (2021). DOI: 10.1002/chem.202103079.	2021
12 -	articolo	Barbosa N.; Sagresti L.; Brancato G.	Photoinduced Azobenzene-Modified DNA Dehybridization: Insights into Local and Cooperativity Effects from a Molecular Dynamics Study	Physical Chemistry Chemical Physics 23, 25170–79 (2021). DOI: 10.1039/DICP04032D.	2021

A tal fine il sottoscritto, sotto la propria responsabilità, ai sensi dell'art.46 e 47 del D.P.R. 445/2000 s.m.i., consapevole delle sanzioni penali previste dall'art.76 dello stesso decreto in caso di dichiarazioni mendaci,

#### DICHIARA

- che le copie delle pubblicazioni indicate nel predetto elenco, presentate esclusivamente su supporto informatico allegato alla domanda di partecipazione o inviate insieme alla domanda per PEC, sono conformi agli originali in proprio possesso e sono già state pubblicate nel rispetto degli eventuali obblighi di legge (come già attestato nella domanda), fatto salvo quanto dichiarato al punto seguente;

- (eventuale) che le pubblicazioni di cui ai numeri \_\_\_\_\_ dell'elenco sono copie di dattiloscritti finali, conformi agli originali in proprio possesso, che sono stati accettati per la pubblicazione ed in particolare:

1) per la pubblicazione n.\_\_\_\_ dell'elenco:

il sottoscritto dichiara che è stata accettata per la pubblicazione dall'Editore \_\_\_\_\_ in data \_\_\_\_\_  
ovvero

allega apposita attestazione di accettazione dell'Editore \_\_\_\_\_ rilasciata in data \_\_\_\_\_

2) per la pubblicazione n.\_\_\_\_ dell'elenco:

il sottoscritto dichiara che è stata accettata per la pubblicazione dall'Editore \_\_\_\_\_ in data \_\_\_\_\_  
ovvero

allega apposita attestazione di accettazione dell'Editore \_\_\_\_\_ rilasciata in data \_\_\_\_\_

3) ....ecc.

Data 06/12/2021

Firma leggibile