

**PROCEDURA SELETTIVA PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE DI
SECONDA FASCIA PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 - MODELLI E
METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE
CHIM/02 - CHIMICA FISICA PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA
DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO, AI SENSI DELL'ART. 18, COMMA 1,
DELLA LEGGE 240/2010 (codice n. 4010)**

**VERBALE N. 2
Valutazione dei candidati**

La Commissione giudicatrice della procedura selettiva indicata in epigrafe, composta da:

Prof. Elena SELLI, Ordinario presso il Dipartimento di Chimica, settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, SSD CHIM/02 - Chimica Fisica, dell'Università degli Studi di Milano

Prof. Ludovico VALLI, Ordinario presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche ed Ambientali, settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, SSD CHIM/02 - Chimica Fisica, dell'Università degli Studi del Salento

Maria Francesca OTTAVIANI, Ordinario presso il Dipartimento di Scienze Pure e Applicate, settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, SSD CHIM/02 - Chimica Fisica, dell'Università degli Studi di Urbino Carlo Bo

si riunisce al completo il giorno 10 giugno 2019 alle ore 14, come previsto dall'art. 12, comma 15, del Regolamento di Ateneo sulle procedure di chiamata ai sensi della Legge 240/2010, avvalendosi di strumenti telematici di lavoro collegiale, ciascuno presso la rispettiva sede.

In apertura di seduta il Presidente della Commissione dà lettura del messaggio di posta elettronica con il quale il Responsabile delle procedure comunica che in data 16 maggio 2019 si è provveduto alla pubblicizzazione dei criteri stabiliti dalla Commissione nella riunione del 16 maggio 2019 mediante pubblicazione sul sito web dell'Ateneo.

La Commissione prende visione dell'elenco dei candidati, che risultano essere:

LO PRESTI Leonardo
MELLA Massimo
PIERACCINI Stefano
VLASOVA Irina

Ciascun commissario dichiara che non sussistono situazioni di incompatibilità, ai sensi degli artt. 51 e 52 c.p.c. e dell'art. 5, comma 2, del D.lgs. 1172/1948, con i candidati. Dichiara inoltre di non trovarsi in alcuna situazione di conflitto di interessi, anche potenziale, con i candidati ai sensi della Legge 190/2012. Ciascun Commissario sottoscrive apposita dichiarazione che si allega al presente verbale.

Constatato che, come previsto dal bando, sono trascorsi almeno 5 giorni dalla pubblicizzazione dei criteri, la Commissione può legittimamente proseguire i lavori con la valutazione dei candidati.



Prima di procedere alla valutazione dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati, vengono prese in esame le pubblicazioni redatte in collaborazione con i commissari della presente procedura di valutazione o con altri coautori non appartenenti alla Commissione, al fine di valutare l'apporto di ciascun candidato.

Nessun candidato risulta avere pubblicazioni svolte in collaborazione con i membri della Commissione.

Successivamente, dopo attenta analisi comparata dei lavori svolti in collaborazione tra il candidato **Leonardo LO PRESTI** ed altri coautori, la Commissione rileva che i contributi scientifici del candidato sono enucleabili e distinguibili, e unanimemente delibera di ammettere alla successiva valutazione di merito tutte le pubblicazioni inviate dal candidato ai fini della valutazione e da lui indicate nel relativo elenco.

Successivamente, dopo attenta analisi comparata dei lavori svolti in collaborazione tra il candidato **Massimo MELLA** ed altri coautori, la Commissione rileva che i contributi scientifici del candidato sono enucleabili e distinguibili, e unanimemente delibera di ammettere alla successiva valutazione di merito tutte le pubblicazioni inviate dal candidato ai fini della valutazione e da lui indicate nel relativo elenco.

Successivamente, dopo attenta analisi comparata dei lavori svolti in collaborazione tra il candidato **Stefano PIERACCINI** ed altri coautori, la Commissione rileva che i contributi scientifici del candidato sono enucleabili e distinguibili, e unanimemente delibera di ammettere alla successiva valutazione di merito le pubblicazioni 1-14 dell'elenco delle pubblicazioni presentate dal candidato ai fini della valutazione.

La pubblicazione n.15 dell'elenco presentato dal candidato Stefano Pieraccini non risulta fra quelle inviate ai fini della valutazione e pertanto non potrà essere valutata.

Successivamente, dopo attenta analisi comparata dei lavori svolti in collaborazione tra il candidato **Irina VLASOVA** ed altri coautori, la Commissione rileva che i contributi scientifici della candidata sono enucleabili e distinguibili, e unanimemente delibera di ammettere alla successiva valutazione di merito tutte le pubblicazioni inviate dalla candidata ai fini della valutazione e da lei indicate nel relativo elenco.

La Commissione procede quindi alla valutazione analitica dei titoli dei candidati in base ai criteri stabiliti nella riunione preliminare.

La Commissione predispone per ciascun candidato un prospetto, allegato al presente verbale (All. 1), nel quale vengono riportati i titoli valutati e i punteggi attribuiti collegialmente a ciascuno di essi relativamente all'attività didattica, all'attività di ricerca e alle pubblicazioni scientifiche, e all'attività gestionale.

Conclusa la valutazione dei titoli e delle pubblicazioni dei candidati, sulla base di quanto stabilito nella prima riunione e della somma dei punteggi riportata da ciascuno, la Commissione stila la seguente graduatoria di merito:

1. LO PRESTI Leonardo
2. MELLA Massimo
3. PIERACCINI Stefano
4. VLASOVA Irina

Vengono pertanto ammessi alla prova orale i seguenti candidati:

LO PRESTI Leonardo
MELLA Massimo
PIERACCINI Stefano

La Commissione si riconvoca per il giorno 9 luglio 2019 alle ore 11 presso il Dipartimento di Chimica, aula G. Bianchi, via Golgi 19, Milano, per lo svolgimento della prova orale.

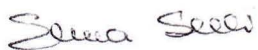
La seduta è tolta alle ore 18.30.

Letto, approvato e sottoscritto.

Milano, 10 giugno 2019

LA COMMISSIONE:

Prof. Elena SELLI



Prof. Ludovico VALLI

Prof. Maria Francesca OTTAVIANI

PROCEDURA SELETTIVA PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE DI SECONDA FASCIA PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE CHIM/02 - CHIMICA FISICA PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO, AI SENSI DELL'ART. 18, COMMA 1, DELLA LEGGE 240/2010 (codice n. 4010)

ALLEGATO 1 AL VERBALE 2

SCHEDA DI RIPARTIZIONE PUNTEGGI

LEONARDO LO PRESTI

ATTIVITA' DIDATTICA (Punteggio massimo attribuibile 25)	punti
1) Attività didattica frontale nei corsi di laurea triennali e scuole di specializzazione	15,9
2) Attività didattica frontale nei percorsi formativi post-laurea	1,2
3) Relatore di elaborati di laurea, di tesi di laurea magistrale, di tesi di dottorato	4,0
4) Attività di tutorato degli studenti di corsi di laurea e di laurea magistrale	0,5
5) Attività di tutorato di dottorandi di ricerca	1,3
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	22,9

ATTIVITA' DI RICERCA (Punteggio massimo attribuibile 17,5)	punti
1) Coordinatore o partecipante di unità Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	0
2) Responsabile scientifico locale di Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	0
3) Coordinatore o partecipante di progetti nazionali competitivi	0
4) Coordinatore o partecipante di progetti locali	1,0
5) Coordinatore di progetto su bando competitivo nazionale o internazionale	3,0
6) Organizzazione di convegno internazionale	1,0
7) Relatori a congressi e convegni di interesse internazionale	1,0
8) Attività di valutazione in selezioni competitive nazionali e internazionali	1,5
9) Membro di editorial board di rivista internazionale	0,5
10) Consistenza complessiva attività di ricerca, intensità, continuità, autonomia	1,8
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	9,8

PUBBLICAZIONI (Punteggio massimo attribuibile 52,5)	Tipologia	Punti
1) P. Sacchi, L. Loconte, G. Macetti, S. Rizzato, L. Lo Presti, <i>Correlations of Crystal Structure and Solubility in Organic Salts: The Case of the Antiplasmodial Drug Piperaquine</i> , Crystal Growth & Design, 2019 , 19, 1399-1410	Articolo su rivista internazionale	3,3
2) A. Gavezzotti, S. Rizzato, L. Lo Presti, <i>The TACO Puzzle: A Phase-Transition Mystery Revisited</i> , Crystal Growth & Design, 2018 , 18, 7219-7227	Articolo su rivista internazionale	3,3

W

3) L. Lo Presti, <i>On the significance of weak hydrogen bonds in crystal packing: a large databank comparison of polymorphic structures</i> , CrystEngComm, 2018 , 20, 5976-5989	Articolo su rivista internazionale	3,5
4) G. Macetti, L. Loconte, S. Rizzato, C. Gatti, L. Lo Presti, <i>Intermolecular Recognition of the Antimalarial Drug Chloroquine: A Quantum Theory of Atoms in Molecules-Density Functional Theory Investigation of the Hydrated Dihydrogen Phosphate Salt from the 103 K X-ray Structure</i> , Crystal Growth & Design, 2016 , 16, 6043-6054	Articolo su rivista internazionale	3,5
5) A. Gavezzotti, V. Colombo, L. Lo Presti, <i>Facts and Factors in the Formation and Stability of Binary Crystals</i> , Crystal Growth & Design, 2016 , 16, 6095-6104	Articolo su rivista internazionale	3,5
6) A. Gavezzotti, L. Lo Presti, <i>Building Blocks of Crystal Engineering: A Large-Database Study of the Intermolecular Approach between C-H Donor Groups and O, N, Cl, or F Acceptors in Organic Crystals</i> , Crystal Growth & Design, 2016 , 16, 2952-2962	Articolo su rivista internazionale	3,5
7) L. Rimoldi, C. Ambrosi, G. Di Liberto, L. Lo Presti, M. Ceotto, C. Oliva, D. Meroni, S. Cappelli, G. Cappelletti, G. Soliveri, S. Ardizzone, <i>Impregnation versus Bulk Synthesis: How the Synthetic Route Affects the Photocatalytic Efficiency of Nb/Ta:N Codoped TiO₂ Nanomaterials</i> , Journal of Physical Chemistry C, 2015 , 119, 24104-24115	Articolo su rivista internazionale	3,5
8) A. Gavezzotti, L. Lo Presti, <i>Theoretical Study of Chiral Carboxylic Acids. Structural and Energetic Aspects of Crystalline and Liquid States</i> , Crystal Growth & Design, 2015 , 15, 3792-3803	Articolo su rivista internazionale	3,5
9) L. Lo Presti, M. Sist, L. Loconte, A. Pinto, L. Tamborini, C. Gatti, <i>Rationalizing the Lacking of Inversion Symmetry in a Noncentrosymmetric Polar Racemate: An Experimental and Theoretical Study</i> , Crystal Growth & Design, 2014 , 14, 5822-5833	Articolo su rivista internazionale	3,5
10) L. Lo Presti, M. Ceotto, F. Spadavecchia, G. Cappelletti, D. Meroni, R. G. Acres, S. Ardizzone, <i>Role of the Nitrogen Source in Determining Structure and Morphology of N-Doped Nanocrystalline TiO₂</i> , Journal of Physical Chemistry C, 2014 , 118, 4797-4807	Articolo su rivista internazionale	3,5
11) G. Saleh, C. Gatti, L. Lo Presti, J. Contreras-García, <i>Revealing Non-Covalent Interactions in Molecular Crystals through Their Experimental Electron Densities</i> , Chemistry - A European Journal, 2012 , 18, 15523-15536	Articolo su rivista internazionale	3,3
12) G. Saleh, R. Soave, L. Lo Presti, R. Destro, <i>Progress in the Understanding of the Key Pharmacophoric Features of the Antimalarial Drug Dihydroartemisinin: An Experimental and Theoretical Charge Density Study</i> , Chemistry - A European Journal, 2013 , 19, 3490-3503	Articolo su rivista internazionale	3,3
13) M. Ceotto, L. Lo Presti, G. Cappelletti, D. Meroni, F. Spadavecchia, R. Zecca, M. Leoni, P. Scardi, C. L. Bianchi, S. Ardizzone, <i>About the Nitrogen Location in Nanocrystalline N-Doped TiO₂: Combined DFT and EXAFS Approach</i> , Journal of Physical Chemistry C, 2012 , 116, 1764-1771	Articolo su rivista internazionale	3,3
14) L. Lo Presti, M. Allietta, M. Scavini, P. Ghigna, L. Loconte, V. Scagnoli, M. Brunelli, <i>Crystal structure and structural phase transitions in the GdBaCo₂O_{5.0} cobaltite</i> , Physical Review B,	Articolo su rivista internazionale	3,5

47

2011, 84, 104107		
15) L. Lo Presti, R. Soave, R. Destro, <i>On the Interplay between CH...O and OH...O Interactions in Determining Crystal Packing and Molecular Conformation: An Experimental and Theoretical Charge Density Study of the Fungal Secondary Metabolite Austdiol (C₁₂H₁₂O₅)</i> , Journal of Physical Chemistry B, 2006, 110 , 6405-6414	Articolo su rivista internazionale	3,5
PUNTEGGIO COMPLESSIVO		51,5

ATTIVITA GESTIONALE, ORGANIZZATIVA E DI SERVIZIO (Punteggio massimo attribuibile 5)	Punti
Partecipazione al Collegio del Dottorato di Ricerca	1,0
Coordinamento e partecipazione a commissioni dipartimentali	2,0
Coordinamento e partecipazione ad attività di terza missione	2,0
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	5,0

PUNTEGGIO TOTALE	89,2 PUNTI
-------------------------	-------------------

68

**PROCEDURA SELETTIVA PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE DI
SECONDA FASCIA PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 - MODELLI E
METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE
CHIM/02 - CHIMICA FISICA PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA
DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO, AI SENSI DELL'ART. 18, COMMA 1,
DELLA LEGGE 240/2010 (codice n. 4010)**

ALLEGATO 1 AL VERBALE 2

SCHEDA DI RIPARTIZIONE PUNTEGGI

MASSIMO MELLA

ATTIVITA' DIDATTICA (Punteggio massimo attribuibile 25)	punti
1) Attività didattica frontale nei corsi di laurea triennali e scuole di specializzazione	15,6
2) Attività didattica frontale nei percorsi formativi post-laurea	2,0
3) Relatore di elaborati di laurea, di tesi di laurea magistrale, di tesi di dottorato	0,2
4) Attività di tutorato degli studenti di corsi di laurea e di laurea magistrale	0,5
5) Attività di tutorato di dottorandi di ricerca	0,4
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	18,7

ATTIVITA' DI RICERCA (Punteggio massimo attribuibile 17,5)	punti
1) Coordinatore o partecipante di unità Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	0
2) Responsabile scientifico locale di Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	1,0
3) Coordinatore o partecipante di progetti nazionali competitivi	0
4) Coordinatore o partecipante di progetti locali	0,5
5) Coordinatore di progetto su bando competitivo nazionale o internazionale	0
6) Organizzazione di convegno internazionale	0
7) Relatori a congressi e convegni di interesse internazionale	2,0
8) Attività di valutazione in selezioni competitive nazionali e internazionali	1,0
9) Membro di editorial board di rivista internazionale	0
10) Consistenza complessiva attività di ricerca, intensità, continuità, autonomia	2,0
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	6,5

PUBBLICAZIONI (Punteggio massimo attribuibile 52,5)	Tipologia	Punti
1) M. S. Gyngazova, L. Grazia, A. Lolli, G. Innocenti, T. Tabanelli, M. Mella, S. Albonetti, F. Cavani, <i>Mechanistic insights into the catalytic transfer hydrogenation of furfural with methanol and alkaline earth oxides</i> , Journal of Catalysis, 2019 , 372, 61-73	Articolo su rivista internazionale	3,5
2) T. Tabanelli, S. Passeri, S. Guidetti, F. Cavani, C. Lucarelli, F. Cargnoni, M. Mella, <i>A cascade mechanism for a simple reaction:</i>	Articolo su rivista	3,5

67

<i>The gas-phase methylation of phenol with methanol, Journal of Catalysis</i> , 2019 , 370, 447–460	internazionale	
3) T. Tabanelli, S. Cocchi, B. Gumina, L. Izzo, M. Mella, S. Passeri, F. Cavani, C. Lucarelli, J. Schütz, W. Bonrath, T. Netscher, <i>Mg/Ga mixed-oxide catalysts for phenol methylation: Outstanding performance in 2,4,6-trimethylphenol synthesis with co-feeding of water</i> , <i>Applied Catalysis A, General</i> , 2018 , 552, 86–97	Articolo su rivista internazionale	2,8
4) A. Chieregato, J. Velasquez-Ochoa, C. Bandinelli, G. Fornasari, F. Cavani, M. Mella, <i>On the Chemistry of Ethanol on Basic Oxides: Revising Mechanisms and Intermediates in the Lebedev and Guerbet reactions</i> , <i>ChemSusChem</i> , 2015 , 8, 377–388	Articolo su rivista internazionale	3,5
5) T. Pasini, A. Lolli, S. Albonetti, F. Cavani, M. Mella, <i>Methanol as a clean and efficient H-transfer reactant for carbonyl reduction: Scope, limitations, and reaction mechanism</i> , <i>Journal of Catalysis</i> , 2014 , 317, 206–219	Articolo su rivista internazionale	3,5
6) M. Mella, L. Izzo, C. Capacchione, <i>The Role of the Metal Center in the Ethylene Polymerization Promoted by Group 4 Complexes Supported by a Tetradentate [OSSO]-Type Bis(phenolato) Ligand</i> , <i>ACS Catalysis</i> , 2011 , 1, 1460–1468	Articolo su rivista internazionale	3,5
7) L. Izzo, M. Mella, <i>Interpreting "Acidity" as a Global Property Controlling Comonomer Reactivity in Olefin Polymerization</i> , <i>Organometallics</i> , 2013 , 32, 3192–3202	Articolo su rivista internazionale	3,3
8) D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi, <i>Positronium chemistry by quantum Monte Carlo. I. Positronium-first row atom complexes</i> , <i>Journal of Chemical Physics</i> , 1998 , 108, 4756–4760	Articolo su rivista internazionale	2,4
9) D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi, <i>Positron Chemistry by Quantum Monte Carlo: II. Ground-state of positron-polar molecule complexes</i> , <i>Journal of Chemical Physics</i> , 1998 , 109, 1716–1720	Articolo su rivista internazionale	2,4
10) M. Casalegno, M. Mella, A. M. Rappe, <i>Computing accurate forces in quantum Monte Carlo using Pulay's corrections and energy minimization</i> , <i>Journal of Chemical Physics</i> , 2003 , 118, 7193–7201	Articolo su rivista internazionale	2,4
11) M. Mella, D. C. Clary, <i>Zero temperature quantum properties of small protonated water clusters $(H_2O)_nH^+$ ($n=1-5$)</i> , <i>Journal of Chemical Physics</i> , 2003 , 119, 10048–10062	Articolo su rivista internazionale	2,8
12) M. Mella, G. Calderoni, F. Cargnoni, <i>Predicting atomic dopant solvation in helium clusters: The $MgHe_n$ case</i> , <i>Journal of Chemical Physics</i> , 2005 , 123, 054328	Articolo su rivista internazionale	2,6
13) P. E. Janeiro-Barral, M. Mella, <i>Study of the Structure, Energetics, and Vibrational Properties of Small Ammonia Clusters $(NH_3)_n$ ($n = 2-5$) Using Correlated <i>ab Initio</i> Methods</i> , <i>Journal of Physical Chemistry A</i> , 2006 , 110, 11244–11251	Articolo su rivista internazionale	3,1
14) M. Mella, J. B. Anderson, <i>Intermolecular forces and fixed-node diffusion Monte Carlo: A brute force test of accuracies for He_2 and $He-LiH$</i> , <i>Journal of Chemical Physics</i> , 2003 , 119, 8225–8228	Articolo su rivista internazionale	2,8
15) S. Chiesa, M. Mella, G. Morosi, <i>Orthopositronium scattering off H and He</i> , <i>Physical Review A</i> , 2002 , 66, 042502	Articolo su rivista internazionale	2,4
PUNTEGGIO COMPLESSIVO		44,5

28

ATTIVITA GESTIONALE, ORGANIZZATIVA E DI SERVIZIO (Punteggio massimo attribuibile 5)	Punti
Partecipazione al Collegio del Dottorato di Ricerca	1,0
Coordinamento e partecipazione a commissioni dipartimentali	2,0
Coordinamento e partecipazione ad attività di terza missione	2,0
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	5,0

PUNTEGGIO TOTALE	74,7 PUNTI
-------------------------	-------------------

58

PROCEDURA SELETTIVA PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE DI SECONDA FASCIA PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 – MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE CHIM/02 – CHIMICA FISICA PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO, AI SENSI DELL'ART. 18, COMMA 1, DELLA LEGGE 240/2010 (codice n. 4010)

ALLEGATO 1 AL VERBALE 2

SCHEMA DI RIPARTIZIONE PUNTEGGI

STEFANO PIERACCINI

ATTIVITA' DIDATTICA (Punteggio massimo attribuibile 25)	punti
1) attività didattica frontale nei corsi di laurea triennali e scuole di specializzazione	10,4
2) attività didattica frontale nei percorsi formativi post-laurea	0,2
3) relatore di elaborati di laurea, di tesi di laurea magistrale, di tesi di dottorato	1,8
4) attività di tutorato degli studenti di corsi di laurea e di laurea magistrale	0,5
5) Attività di tutorato di dottorandi di ricerca	0,6
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	13,5

ATTIVITA' DI RICERCA (Punteggio massimo attribuibile 17,5)	punti
1) Coordinatore o partecipante di unità Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	0
2) Responsabile scientifico locale di Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	0
3) Coordinatore o partecipante di progetti nazionali competitivi	0,5
4) Coordinatore o partecipante di progetti locali	0,5
5) Coordinatore di progetto su bando competitivo nazionale o internazionale	0
6) Organizzazione di convegno internazionale	0
7) Relatori a congressi e convegni di interesse internazionale	0
8) Attività di valutazione in selezioni competitive nazionali e internazionali	0
9) Membro di editorial board di rivista internazionale	0
10) Consistenza complessiva attività di ricerca, intensità, continuità, autonomia	1,4
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	2,4

PUBBLICAZIONI (punteggio massimo attribuibile 52,5)	Tipologia	Punti
1) E. Gandini, F. Dapiaggi, F. Oliva, S. Pieraccini, M. Sironi, <i>Well-Tempered MetaDynamics based method to evaluate universal peptidomimetics</i> , Chemical Physics Letters, 2018 , 706, 729	Articolo su rivista internazionale	2,6
2) D. Franchini, F. Dapiaggi, S. Pieraccini, A. Forni, M. Sironi, <i>Halogen bonding in the framework of classical force fields: The case of chlorine</i> , Chemical Physics Letters, 2018 , 712, 89	Articolo su rivista internazionale	2,4

3) F. Dapiaggi, S. Pieraccini, D. Potenza, F. Vasile, H. Macut, S. Pellegrino, A. Aliverti, M. Sironi, <i>Computer aided design and NMR characterization of an oligopeptide targeting the Ebola virus VP24 protein</i> , New Journal of Chemistry, 2017 , 41, 4308	Articolo su rivista internazionale	3,3
4) A. Forni, S. Pieraccini, D. Franchini, M. Sironi, <i>Assessment of DFT Functionals for QTAIM Topological Analysis of Halogen Bonds with Benzene</i> , Journal of Physical Chemistry A, 2016 , 120, 9071	Articolo su rivista internazionale	2,4
5) F. Dapiaggi, S. Pieraccini, M. Sironi, <i>In silico study of VP35 inhibitors: from computational alanine scanning to essential dynamics</i> , Molecular Biosystems, 2015 , 11, 2152	Articolo su rivista internazionale	2,6
6) A. Forni, S. Pieraccini, S. Rendine, M. Sironi, <i>Halogen Bonds with Benzene: An Assessment of DFT Functionals</i> , Journal of Computational Chemistry, 2014 , 35, 386	Articolo su rivista internazionale	3,1
7) S. Chaurasia, S. Pieraccini, R. De Gonda, S. Conti, M. Sironi, <i>Molecular insights into the stabilization of protein-protein interactions with small molecule: The FKBP12-rapamycin-FRB case study</i> , Chemical Physics Letters, 2013 , 587, 68	Articolo su rivista internazionale	2,6
8) S. Pieraccini, S. Conti, S. Chaurasia, M. Sironi, <i>Modelling the effect of osmolytes on peptide mechanical unfolding</i> , Chemical Physics Letters, 2013 , 578, 138	Articolo su rivista internazionale	2,8
9) S. Pieraccini, S. Rendine, C. Jobichen, P. Domadia, J. Sivaraman, P. Francescato, G. Speranza, M. Sironi, <i>Computer aided design of FtsZ targeting oligopeptides</i> , RSC Advances, 2013 , 3, 1739	Articolo su rivista internazionale	2,8
10) S. Pieraccini, R. De Gonda, M. Sironi, <i>Molecular modeling of the inhibition of protein-protein interactions with small molecules: the IL2-IL2Rα case</i> , Chemical Physics Letters, 2011 , 517, 217	Articolo su rivista internazionale	2,3
11) G. Saladino, S. Pieraccini, S. Rendine, T. Recca, P. Francescato, G. Speranza, M. Sironi, <i>Metadynamics Study of a β-Hairpin Stability in Mixed Solvents</i> , Journal of the American Chemical Society, 2011 , 133, 2897	Articolo su rivista internazionale	3,3
12) S. Rendine, S. Pieraccini, A. Forni, M. Sironi, <i>Halogen bonding in ligand-receptor systems in the framework of classical force fields</i> , Physical Chemistry Chemical Physics, 2011 , 13, 19508	Articolo su rivista internazionale	3,1
13) S. Pieraccini, G. Saladino, G. Cappelletti, D. Cartelli, P. Francescato, G. Speranza, P. Manitto, M. Sironi, <i>In silico design of tubulin-targeted antimetabolic peptides</i> , Nature Chemistry, 2009 , 1, 642	Articolo su rivista internazionale	3,5
14) S. Pieraccini, L. Burgi, A. Genoni, A. Benedusi, M. Sironi, <i>Atomic level description of the protecting effect of osmolytes against thermal denaturation of proteins</i> , Chemical Physics Letters, 2007 , 438, 298	Articolo su rivista internazionale	2,3
15) S. Pieraccini, M. Sironi, G. Colombo, <i>Modeling enzymatic processes: A molecular simulation analysis of the origins of regioselectivity</i> , Chemical Physics Letters, 2006 , 418, 373	Articolo su rivista internazionale	NV*
PUNTEGGIO COMPLESSIVO		39,1

* NV = non valutabile: la pubblicazione indicata dal candidato come pubblicazione n.15 dell'elenco delle pubblicazioni non corrisponde ad alcuna delle 15 pubblicazioni inviate.

ATTIVITA GESTIONALE, ORGANIZZATIVA E DI SERVIZIO (punteggio massimo attribuibile 5)	Punti
Partecipazione al Collegio del Dottorato di Ricerca	1,0
Coordinamento e partecipazione a commissioni dipartimentali	0
Coordinamento e partecipazione ad attività di terza missione	0
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	1,0

PUNTEGGIO TOTALE	56,0 PUNTI
-------------------------	-------------------

49

PROCEDURA SELETTIVA PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE DI SECONDA FASCIA PER IL SETTORE CONCORSUALE 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE CHIM/02 - CHIMICA FISICA PRESSO IL DIPARTIMENTO DI CHIMICA DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO, AI SENSI DELL'ART. 18, COMMA 1, DELLA LEGGE 240/2010 (codice n. 4010)

ALLEGATO 1 AL VERBALE 2

SCHEDA DI RIPARTIZIONE PUNTEGGI

IRINA VLASOVA

ATTIVITA' DIDATTICA (Punteggio massimo attribuibile 25)	punti
1) attività didattica frontale nei corsi di laurea triennali e scuole di specializzazione	5,0
2) attività didattica frontale nei percorsi formativi post-laurea	0
3) relatore di elaborati di laurea, di tesi di laurea magistrale, di tesi di dottorato	1,4
4) attività di tutorato degli studenti di corsi di laurea e di laurea magistrale	0,5
5) Attività di tutorato di dottorandi di ricerca	0,2
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	7,1

ATTIVITA' DI RICERCA (Punteggio massimo attribuibile 17,5)	punti
1) Coordinatore o partecipante di unità Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	0
2) Responsabile scientifico locale di Progetto di ricerca Europeo/Internazionale	0
3) Coordinatore o partecipante di progetti nazionali competitivi	0
4) Coordinatore o partecipante di progetti locali	0
5) Coordinatore di progetto su bando competitivo nazionale o internazionale	0
6) Organizzazione di convegno internazionale	0
7) Relatori a congressi e convegni di interesse internazionale	0
8) Attività di valutazione in selezioni competitive nazionali e internazionali	0
9) Membro di editorial board di rivista internazionale	0
10) Consistenza complessiva attività di ricerca, intensità, continuità, autonomia	1,0
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	1,0

PUBBLICAZIONI (punteggio massimo attribuibile 52,5)	Tipologia	Punti
1) I. M. Vlasova, A. A. Vlasova, A. M. Saletskii, <i>Complexation of Serum Albumins and Triton X-100: Quenching of Tryptophan Fluorescence and Analysis of the Rotational Diffusion of Complexes</i> , Russian Journal of Physical Chemistry A, 2016 , 90, 1479-1483	Articolo su rivista internazionale	2,0
2) I. M. Vlasova, A. A. Vlasova, G. R. Grapendaala, A. M. Saletskii, <i>Association Constants in the Bovine Serum</i>	Articolo su rivista	1,5

47

<i>Albumin/Human Serum Albumin-Tween 20 System in Aqueous Solutions</i> , Russian Journal of Physical Chemistry A, 2018 , 92, 712-716	internazionale	
3) I. M. Vlasova, A. A. Kuleshova, A. A. Vlasov, A. M. Saletskii, <i>Rotational Diffusion of Markers of the Fluorescein Family in Solutions of Bovine Serum Albumin, According to the Data from Polarized Fluorescence</i> , Russian Journal of Physical Chemistry A, 2015 , 89, 336-340	Articolo su rivista internazionale	2,0
4) I. M. Vlasova, V. V. Zhuravleva, A. M. Saletskii, <i>Rotational Diffusion of Bovine Serum Albumin Denaturated by Sodium Dodecylsulfate, According to Data from Tryptophan Fluorescence</i> , Russian Journal of Physical Chemistry A, 2014 , 88, 551-556.	Articolo su rivista internazionale	2,0
5) I. M. Vlasova, A. A. Kuleshova, A. A. Vlasov, A. M. Saletsky, <i>Investigation of binding of nanomarkers of fluorescein family to bovine 4 serum albumin at various values of pH: spectroscopic study</i> , Journal of Molecular Structure, 2013 , 1051, 89-94	Articolo su rivista internazionale	2,8
6) I. M. Vlasova, V. V. Zhuravleva, A. M. Saletsky, <i>Denaturation of Bovine Serum Albumin Initiated by Sodium Dodecyl Sulfate as Monitored via the Intrinsic Fluorescence of the Protein</i> , Russian Journal of Physical Chemistry B, 2014 , 8, 385-390	Articolo su rivista internazionale	2,0
7) I. M. Vlasova, V. V. Zhuravleva, A. A. Vlasov, A. M. Saletsky, <i>Interaction of cationic surfactant cethyltrimethylammonium bromide with 3 bovine serum albumin in dependence on pH: A study of tryptophan fluorescence</i> , Journal of Molecular Structure, 2013 , 1034, 89-94	Articolo su rivista internazionale	2,8
8) I. M. Vlasova, V. V. Zhuravleva, A. M. Saletskii, <i>Denaturation of Bovine Serum Albumin under the Action of Cetyltrimethylammonium Bromide, According to Data from Fluorescence Analysis</i> , Russian Journal of Physical Chemistry A, 2013 , 87, 1027-1034.	Articolo su rivista internazionale	2,0
9) I. M. Vlasova, V. V. Zhuravleva, A. M. Saletskii, <i>Determination of the Parameters of the Rotational Diffusion of Complexes of Serum Albumins with Triton X 100 from Analysis of Tryptophan Fluorescence</i> , Russian Journal of Physical Chemistry B, 2013 , 7, 562-567	Articolo su rivista internazionale	2,0
10) I. M. Vlasova, V. V. Zhuravleva, A. M. Saletskii, <i>Denaturation of Human Serum Albumin under the Action of Cetyltrimethylammonium Bromide According to Fluorescence Polarization Data of Protein</i> , Russian Journal of Physical Chemistry A, 2012 , 86, 509-515	Articolo su rivista internazionale	2,0
11) I.M. Vlasova, E.M. Bukharova, A.A. Kuleshova, A.M. Saletsky, <i>Spectroscopic investigations of interaction of fluorescent nanomarkers of fluorescein family with human serum albumin at different values of pH</i> , Current Applied Physics, 2011 , 11, 1126-1132	Articolo su rivista internazionale	2,8
12) I. M. Vlasova, A. A. Kuleshova, A. I. Panchishin, A. A. Vlasov, <i>Investigation of interaction of fluorescent marker Bengal Rose with human 3 serum albumin at various values of pH</i> , Journal of Molecular Structure, 2012 , 1016, 1-7	Articolo su rivista internazionale	2,8
13) I. M. Vlastova, A. M. Saletsky, <i>Investigation of influence of different values of pH on mechanisms of binding of human serum albumin with markers of fluorescein family</i> , Journal of Molecular Structure, 2009 , 936, 220-227	Articolo su rivista internazionale	2,8

68

14) I. M. Vlasova, E. M. Bukharova, A. M. Saletskii, <i>Rotational Diffusion of Fluorescein Family Markers in Solutions of Human Serum Albumin</i> , Russian Journal of Physical Chemistry A, 2011 , 85, 876–880	Articolo su rivista internazionale	2,0
15) I. M. Vlastova, A. M. Saletsky, <i>Raman spectroscopy in comparative investigations of mechanisms of binding of three molecular probes – fluorescein, eosin, and erythrosin – to human serum albumin</i> , Laser Physics Letters, 2008 , 11, 834–839	Articolo su rivista internazionale	2,8
PUNTEGGIO COMPLESSIVO		34,3

ATTIVITA GESTIONALE, ORGANIZZATIVA E DI SERVIZIO (punteggio massimo attribuibile 5)	Punti
Partecipazione al Collegio del Dottorato di Ricerca	0
Coordinamento e partecipazione a commissioni dipartimentali	0
Coordinamento e partecipazione ad attività di terza missione	0
PUNTEGGIO COMPLESSIVO	0

PUNTEGGIO TOTALE	42,4 PUNTI
-------------------------	-------------------

