

PROCEDURA COMPARATIVA PER LA CHIAMATA DI N. 1 POSTO DI RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO A TEMPO PIENO - AI SENSI DELL'ART. 24 CO. 3 LETT. A) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240 - S.C.: 03/B1 – FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI - S.S.D.: CHIM/03 – CHIMICA GENERALE E INORGANICA - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI FARMACIA (BANDITA CON D.R. N. 1114/2021 PROT. N. 65536 - DEL 02/09/2021 AVVISO G.U. N. 75 DEL 21/09/2021).

**VERBALE N. 2
(Valutazione preliminare dei titoli, dei curriculum
e della produzione scientifica dei candidati)**

La Commissione giudicatrice della procedura sopraindicata, nominata con D.R. n. 1901/2021-prot. n. 95695 del 01/12/2021 composta dai:

Prof.ssa Nadia Balucani, Università degli Studi di Perugia

Prof. Alessandro Caselli, Università degli Studi di Milano

Prof. Savino Longo, Università degli Studi di Bari Aldo Moro

si insedia al completo per via telematica utilizzando la piattaforma Teams il giorno 22 febbraio 2022 alle ore 12:00, dai seguenti account riferiti ai componenti della Commissione, come da elenco che segue:

Prof.ssa Nadia Balucani,

Prof. Alessandro Caselli,

Prof. Savino Longo,

La Commissione precisa che si riunisce per via telematica, attraverso la modalità di conversazione diretta via Teams in presenza di tutti seguita dallo scambio di posta elettronica per l'approvazione di quanto discusso dalla Commissione. La riunione telematica si sviluppa nel modo seguente: i Commissari, tramite collegamento sincrono (a mezzo Teams), si scambiano informazioni ed opinioni in conversazione diretta, al fine di addivenire alla decisione finale che si andrà formando progressivamente con il concorso contemporaneo di tutti i componenti della Commissione.

Il Presidente si trova nel suo ufficio presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Bari Aldo Moro; lo stesso, è da intendersi sede della riunione.

Di quanto sopra, sarà dato atto da parte del Segretario verbalizzante che provvederà alla stesura dei verbali.

Lo scambio della documentazione (es.: verbale in bozza) potrà avvenire tramite e-mail personale dei Commissari, come da elenco che segue:

Prof.ssa Nadia Balucani, account e-mail nadia.balucani@unipg.it

Prof. Alessandro Caselli, account e-mail alessandro.caselli@unimi.it

Prof. Savino Longo, account e-mail savino.longo@uniba.it

Il Presidente ed il Segretario accertano che lo strumento adottato garantisca la sicurezza dei dati e delle informazioni scambiate, l'effettiva compartecipazione dei componenti alla riunione, la contemporaneità delle decisioni, la possibilità

immediata di visionare gli atti della riunione, di intervenire nella discussione, di scambiare documenti, di esprimere il proprio voto ed infine di approvare i singoli verbali.

La Commissione procede allo svolgimento delle seguenti attività:

- presa visione dell'elenco dei candidati (anche mediante l'accesso qualificato alla piattaforma telematica di Ateneo);
- dichiarazione di ciascun commissario che non sussistono situazioni di incompatibilità con i candidati ai sensi degli artt. 51 e 52 c.p.c. e di non avere relazioni di parentela, coniugio o di unione civile o convivenza regolamentati ai sensi della L.76/2016, di parentela ed affinità, entro il quarto grado incluso, con gli stessi;
- dichiarazione di ciascun commissario di non sussistenza di rapporti di collaborazione che presentino i caratteri della sistematicità, stabilità, continuità tali da dar luogo ad un vero e proprio sodalizio professionale con i candidati;
- dichiarazione di ciascun commissario di assenza di interessi ovvero assenza di conflitto di interessi rispetto ai lavori da valutare;
 - verifica del possesso dei requisiti da parte dei candidati;
 - verifica della corrispondenza della documentazione caricata (up load) sulla piattaforma dedicata e gli elenchi dei documenti, titoli e pubblicazioni presentate;
 - verifica del rispetto del limite massimo delle pubblicazioni che ciascun candidato poteva presentare come indicato nel bando di selezione;
 - valutazione preliminare comparativa dei candidati, con esame analitico del curriculum, dei titoli, delle pubblicazioni scientifiche dei candidati ed espressione di motivato giudizio analitico.
 - Comunicazione dell'elenco degli ammessi.

In apertura di seduta il Presidente della Commissione comunica che in data 16 febbraio 2022 si è provveduto alla pubblicizzazione dei criteri stabiliti dalla Commissione nella riunione del 9 febbraio 2022 mediante pubblicazione sul sito web dell'Ateneo.

Constatato che, come previsto dal bando, dopo la pubblicizzazione dei criteri, la Commissione può legittimamente proseguire i lavori.

La Commissione, prima di procedere all'esame dei titoli, prende visione dell'elenco, fornito dall'Amministrazione, nel quale sono riportati i nominativi dei candidati che hanno presentato regolare domanda di partecipazione, con l'indicazione se abbiano o meno inviato le domande, ivi compreso il relativo perfezionamento, nei termini stabiliti dal bando.

La Commissione rileva dalla predetta comunicazione che non sono presenti candidati stranieri e che per tanto non sarà necessario procedere all'accertamento della conoscenza della lingua italiana.

Di seguito l'elenco dei candidati che hanno presentato domanda e che non sono stati esclusi a seguito di istruttoria degli uffici per tardività della domanda o mancato perfezionamento della stessa:

- Paciotti Roberto

Ciascun Commissario, presa visione dei dati anagrafici riguardanti i singoli candidati, dichiara che non sussistono situazioni di incompatibilità con i candidati ai sensi degli artt. 51 e 52 c.p.c. e di non avere rapporto di parentela, di unione civile o convivenza regolamentati ai sensi della L.76/2016, di affinità, entro il quarto grado incluso, con gli stessi.

Ciascun Commissario dichiara che non sussistono collaborazioni che presentino i caratteri della sistematicità, stabilità, continuità tali da dar luogo ad un vero e proprio sodalizio professionale con i candidati, e, inoltre, dell'assenza di interessi

ovvero assenza di conflitto di interessi rispetto ai lavori da valutare.

Successivamente la Commissione verifica il possesso dei requisiti di partecipazione dell'unico candidato alla data di scadenza per la presentazione delle domande, dichiarando che tutti i candidati rispondono ai requisiti di ammissione di cui all'art. 3 del Bando.

La Commissione procede poi a verificare la corrispondenza della documentazione caricata (uploaded) sulla piattaforma dedicata e gli elenchi dei documenti, titoli e pubblicazioni presentate, dichiarando che si evidenzia corrispondenza. In merito al rispetto del limite massimo delle pubblicazioni che ciascun candidato poteva presentare come indicato nel bando di selezione (n. massimo di pubblicazioni da presentare pari a 12), la commissione rileva che il candidato ha presentato un numero di pubblicazioni che eccede tale limite. La commissione decide, pertanto, che saranno valutate solo le prime 12 pubblicazioni dell'elenco allegato.

La Commissione, richiamati integralmente i criteri indicati nella riunione del 9 febbraio 2022, rammenta che sulla scorta di quanto indicato nel verbale n. 1 effettuerà la valutazione preliminare dei candidati relativamente ai titoli, curriculum, pubblicazioni – ivi compresa la tesi di dottorato se presentata - produzione scientifica complessiva dei candidati mediante l'espressione di un motivato giudizio analitico al fine di selezionare i candidati comparativamente più meritevoli che verranno ammessi alla discussione pubblica dei titoli e della produzione scientifica, in misura del venti per cento del numero degli stessi e comunque non inferiore a sei unità. I candidati saranno tutti ammessi alla discussione pubblica qualora il loro numero sia pari o inferiore a sei.

La Commissione rammenta, altresì, che per quanto riguarda i lavori in collaborazione con i Commissari della presente procedura o con altri coautori non appartenenti alla Commissione, al fine di valutare l'apporto di ciascun candidato, la Commissione ha stabilito che saranno valutabili solo pubblicazioni scientifiche nelle quali l'apporto del candidato sia enucleabile e distinguibile.

In particolare, la Commissione richiama i criteri già stabiliti nel primo verbale.

Verificato che nessun commissario ha pubblicazioni in comune con il candidato, dopo attenta analisi comparata dei lavori svolti in collaborazione tra il candidato ed altri coautori, la Commissione rileva che i contributi scientifici del candidato sono enucleabili e distinguibili tenuto conto dei criteri stabiliti nel verbale n. 1 e, unanimemente, delibera di ammettere alla successiva valutazione di merito i primi dodici lavori indicati dal candidato nell'Elenco delle Pubblicazioni Scientifiche presentato nella domanda.

La Commissione, richiamati integralmente i criteri indicati nella prima riunione procede alla valutazione preliminare del candidato relativamente ai titoli, curriculum, pubblicazioni – ivi compresa la tesi di dottorato se presentata - produzione scientifica complessiva mediante l'espressione di un motivato giudizio analitico espresso da parte dei singoli Commissari, seguito dal giudizio collegiale espresso dall'intera Commissione.

La Commissione, al fine dell'espressione del suindicato giudizio, dichiara di prendere in esame la domanda formulata dal candidato, ed in particolare il curriculum, l'elenco dei titoli, le pubblicazioni come indicate nell'elenco allegato alla domanda nonché la produzione scientifica complessiva.

La documentazione oggetto di valutazione è allegata al presente verbale quale parte integrante e sostanziale come di seguito indicata:

- Allegato A) curriculum e/o elenco titoli
- Allegato B) pubblicazione presentate dal candidato come indicate nel relativo elenco
- Allegato C) elenco riferito alla produzione scientifica complessiva

La Commissione procede ad effettuare la valutazione preliminare del candidato con motivato giudizio analitico reso mediante l'allegato D – giudizi analitici (sia individuali che collegiali).

Terminata la valutazione preliminare, la Commissione ammette al colloquio come indicato nel bando di concorso l'unico candidato Pacioti Roberto.

Il nominativo del candidato ammesso viene comunicato tempestivamente al Responsabile della Procedimento che provvede ad informarlo sull'esito della preselezione, mediante pubblicazione dell'elenco degli ammessi e unitamente ai motivati giudizi analitici sull'albo ufficiale on line di Ateneo e contestualmente inseriti nel sito dell'Ateneo.

Il presente verbale viene redatto dal Segretario verbalizzante, letto e sottoscritto con dichiarazione di formale sottoscrizione per via telematica dai Prof.ri Longo e Caselli, firmato digitalmente dalla Prof.ssa Balucani e inviato per posta elettronica, in formato .pdf, agli indirizzi ateneo@pec.unich.it al Responsabile del Procedimento per la pubblicazione sull'Albo Ufficiale on-line di Ateneo e sul sito web dell'Ateneo.

Alle ore 16:20 la Commissione termina i lavori e decide di riunirsi il giorno 8 marzo 2022 alle ore 10:50.

Letto, approvato e sottoscritto.

LA COMMISSIONE:

Prof.ssa Nadia Balucani (Il Segretario)

Prof. Alessandro Caselli (Il Commissario)

Prof. Savino Longo (Il Presidente)

Candidato Piciotti Roberto

Giudizio della Prof.ssa Nadia Balucani relativo a:

TITOLI E CURRICULUM

DESCRIZIONE: Il candidato ha conseguito la laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con votazione 110/110 e lode nel 2010, ha usufruito di una borsa di ricerca di alcuni mesi presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi G. D'Annunzio Chieti-Pescara prima di iniziare il dottorato presso la stessa istituzione (titolo conseguito nel 2016). Dopo il dottorato ha usufruito di altre borse e assegni di ricerca per un totale di circa quattro anni. La sua attività di ricerca ha riguardato studi teorico-computazionali di spettroscopia infrarossa di complessi metallici, simulazioni MD di processi a carico di proteine, determinazione con tecniche di molecular docking della affinità di legame fra ligandi e metalloenzimi. Ha partecipato a scuole estive in Italia e all'estero. Si è recato in istituzioni estere per eseguire parte della sua attività di ricerca durante la tesi di laurea e di dottorato. Non risulta attività didattica.

GIUDIZIO: L'attività svolta dal candidato, enucleabile dai titoli e dal curriculum allegati alla domanda di partecipazione alla presente procedura comparativa, risulta congruente con le tematiche del SSD e in linea con l'anzianità di carriera. Sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, curriculum e titoli sono valutati come buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE PER LA VALUTAZIONE

DESCRIZIONE: (breve descrizione degli elementi considerati)

Il candidato ha presentato un elenco di 18 pubblicazioni, nonostante il bando prevedesse la presentazione di un numero massimo di 12 pubblicazioni. Pertanto, secondo quanto previsto dall'art. 3 del bando solo le prime 12 dell'elenco allegato sono state considerate per la presente valutazione. Tali pubblicazioni sono edite tutte su riviste internazionali, indicizzate sulle principali banche dati internazionali. Le pubblicazioni sono congruenti con le tematiche del settore concorsuale 03/B1 e con il SSD oggetto del bando. L'impact factor medio delle 12 pubblicazioni valutate è di 3,42 e l'impatto nella comunità di riferimento è testimoniato da un buon numero di citazioni ricevute. In 5 delle 12 pubblicazioni il candidato risulta primo autore, mostrando un apporto individuale di buon livello. Negli altri casi, l'apporto individuale del candidato è stato giudicato positivamente in base alla coerenza del lavoro con l'attività scientifica complessiva.

GIUDIZIO: Riferendosi ai criteri individuati nel verbale n.1, dopo un attento esame delle prime 12 pubblicazioni fra quelle indicate nell'elenco allegato alla domanda dal candidato, il giudizio è molto buono.

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

DESCRIZIONE: La produzione scientifica complessiva sottoposta dal candidato vede 18 pubblicazioni scientifiche, di cui 14 su riviste internazionali dotate di impact factor. Data la ancor breve carriera accademica del candidato, gli indicatori bibliometrici (numero di citazioni totale e medio per pubblicazione, H-index, impact factor totale e medio) risultano complessivamente molto soddisfacenti.

GIUDIZIO: La produzione scientifica del candidato risulta di buon livello, congruente con il settore concorsuale oggetto del bando e con il SSD CHIM/03. Sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, il giudizio è molto buono.

GIUDIZIO COMPLESSIVO

Dell'analisi dei titoli, del curriculum, dei lavori presentati per la valutazione e della produzione scientifica complessiva, sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, la sottoscritta esprime un giudizio complessivamente molto buono.

TITOLI E CURRICULUM

DESCRIZIONE: Il candidato si è laureato in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche a ottobre 2010 presso l'Università degli Studi "La sapienza" con votazione 110/110 con lode con una tesi dal titolo "Interazione di NO con Gruppi Emme: Caratteristiche Spettroscopiche e Strutturali. Dopo una borsa di Ricerca, presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, nel 2016 ha conseguito il PhD presso la stessa università con una tesi dal Titolo "QM and MM calculations on biological systems: from model molecules to proteins". Le tematiche affrontate sono congruenti con il SSD CHIM/03, Durante il periodo di dottorato ha trascorso quattro mesi come "visiting student" presso la German Research school for Simulation Sciences, Juelich-Forschungszentrum (Germania). Dopo il periodo di dottorato, dal giugno 2017 al giugno 2021, ha ricoperto il ruolo di borsista di ricerca e di assegnista di ricerca per 4 anni presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, lavorando sempre su tematiche congruenti con il SSD CHIM/03.

Tra il 2015 e il 2017, ha avuto altre esperienze lavorative presso imprese private. L'attività scientifica del candidato è valida e coerente con il settore scientifico.

GIUDIZIO: L'attività svolta dal candidato, enucleabile dai titoli e dal curriculum allegati alla domanda di partecipazione alla presente procedura comparativa, risulta ampia e sostanzialmente congruente con le tematiche del SSD e/o con l'impegno scientifico previsto dal bando. Risulta invece molto scarsa l'attività didattica. Tuttavia, sulla base della valutazione del curriculum e dei titoli secondo i criteri indicati nel verbale n. 1, il giudizio complessivo sui titoli presentati è buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE PER LA VALUTAZIONE

DESCRIZIONE: Il candidato ha presentato a questa commissione un elenco di 18 pubblicazioni, di cui le prime 12 pubblicazioni (il numero massimo previsto dal bando) sono collocate su riviste internazionali e indicizzate sulle principali banche dati internazionali e congruenti con il SSD CHIM/03 e/o con l'impegno scientifico previsto dal bando. L'impact factor medio delle pubblicazioni valutate è di 3,42 e la loro rilevanza è testimoniata da un buon numero di citazioni ricevute. In 5 delle 12 pubblicazioni il candidato risulta primo autore, mostrando un apporto individuale di buon livello.

GIUDIZIO: Alla luce dell'analisi di cui sopra e dopo approfondito esame delle 12 pubblicazioni presentate, utilizzando i criteri definiti nel verbale n. 1, il giudizio è molto buono.

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

DESCRIZIONE: La produzione scientifica dichiarata dal candidato comprende 18 pubblicazioni su riviste internazionali, tutte indicizzate sulle principali banche dati internazionali, di cui alcune con fattori di impatto elevati. Buono il numero complessivo di citazioni pari a 145 e il valore dell'h-index di 7.

GIUDIZIO La produzione scientifica del candidato risulta di buon livello e congruente con il SSD CHIM/03 e/o con l'impegno scientifico previsto dal bando. Sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, il giudizio è buono.

GIUDIZIO COMPLESSIVO

Dell'analisi dei titoli, del curriculum, dei lavori presentati per la valutazione e della produzione scientifica complessiva, sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, il sottoscritto esprime un giudizio complessivamente molto buono.

Giudizio del Prof. Savino Longo relativo a

TITOLI E CURRICULUM

DESCRIZIONE: Laureato in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche con il massimo dei voti e Lode, dottore di Ricerca in Scienze del Farmaco, il candidato ha anche ricoperto posizioni da assegnista di ricerca. Si è occupato con coerenza e continuità, nel periodo di tempo dalla Laurea fino al presente procedimento, di metodi di calcolo a livello dello stato dell'arte applicati alla determinazione dello spettro infrarosso di una ampia serie di molecole metallo organiche di interesse farmacologico. Queste metodologie rientrano concretamente nell'ambito della chimica inorganica e sono anzi parte essenziale del lavoro di ricerca secondo gli attuali trend.

GIUDIZIO L'attività svolta dal candidato, enucleabile dai titoli e dal curriculum allegati alla domanda di partecipazione alla presente procedura comparativa, risulta ampia e sostanzialmente congruente con le tematiche del SSD e/o con l'impegno scientifico previsto dal bando. Sulla base della valutazione del curriculum e dei titoli secondo i criteri indicati nel verbale n. 1, il sottoscritto esprime giudizio molto buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE PER LA VALUTAZIONE

DESCRIZIONE: Il candidato ha impiegato sia metodi di determinazione strutturale sia metodi di meccanica molecolare: in questo modo ha contribuito in modo sostanziale ha numerosi studi producendo spettri teorici in generale in buon accordo con quelli sperimentali. Dall'analisi delle pubblicazioni presentate è evidente il ruolo essenziale delle simulazioni in ognuno dei lavori in oggetto. Dalle dichiarazioni del candidato il sottoscritto evince che egli ha contribuito in tutti i casi alla esecuzione concreta dei calcoli e alla loro impostazione e in alcuni casi se ne è fatto carico in modo sostanziale.

GIUDIZIO Alla luce dell'analisi di cui sopra e dopo approfondito esame delle 12 pubblicazioni valutate, utilizzando i criteri definiti nel verbale n. 1, il sottoscritto esprime un giudizio molto buono.

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

DESCRIZIONE: per via della coerenza dell'intero Corpus di pubblicazioni presentate, sia dal punto di vista della metodologia applicata che dal punto di vista dei casi di studio, è possibile estrapolare al corpus totale le osservazioni relative a quello scelto per il giudizio analitico.

GIUDIZIO La produzione scientifica del candidato risulta di ottimo livello e congruente con il settore scientifico, e molto ben congruente con l'attività prevista dal bando. Sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, il sottoscritto esprime un giudizio buono.

GIUDIZIO COMPLESSIVO

Dell'analisi dei titoli, del curriculum, dei lavori presentati per la valutazione e della produzione scientifica complessiva, sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, il sottoscritto esprime un giudizio complessivamente molto buono.

Giudizio collegiale relativo a

TITOLI E CURRICULUM

DESCRIZIONE: Laureatosi in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche a ottobre 2010 presso l'Università degli Studi "La Sapienza" con votazione 110/110 con lode con una tesi dal titolo *Interazione di NO con Gruppi Eme: Caratteristiche Spettroscopiche e Strutturali*, dopo aver usufruito di una borsa di Ricerca presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, nel 2016 ha conseguito il Dottorato di Ricerca in Scienze del Farmaco presso la stessa università con una tesi dal Titolo *QM and MM calculations on biological systems: from model molecules to proteins*. Durante il periodo di dottorato ha trascorso quattro mesi come "visiting student" presso la German Research school for Simulation Sciences, Juelich-Forschungszentrum (Germania) e durante il periodo di tesi ha svolto attività di ricerca presso l'Università di Paris-Sud XI.

Dopo aver conseguito il dottorato, dal giugno 2017 al giugno 2021, ha ricoperto il ruolo di borsista di ricerca e di assegnista di ricerca per circa 4 anni presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, lavorando sempre su tematiche congruenti con il SSD CHIM/03. Non risulta aver svolto attività didattica. Tra il 2015 e il 2017, ha avuto altre esperienze lavorative presso imprese private. L'attività scientifica del candidato è giudicata valida e coerente con le tematiche del settore concorsuale 03/B1 e con il settore scientifico disciplinare CHIM/03 oggetto del bando.

GIUDIZIO: Titoli e curriculum allegati alla domanda di partecipazione alla presente procedura comparativa delineano una attività di ricerca congruente con le tematiche del SSD e in linea con l'anzianità. Non risulta attività didattica. Sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, curriculum e titoli sono valutati come buono.

PUBBLICAZIONI PRESENTATE PER LA VALUTAZIONE

DESCRIZIONE: (breve descrizione degli elementi considerati)

Il candidato ha presentato un elenco di 18 pubblicazioni, nonostante il bando prevedesse la presentazione di un numero massimo di 12 pubblicazioni. Pertanto, solo le prime 12 dell'elenco allegate sono state considerate per la presente valutazione. Le 12 pubblicazioni valutate risultano editate su riviste internazionali, indicizzate sulle principali banche dati internazionali. Le pubblicazioni sono congruenti con le tematiche del settore concorsuale 03/B1 e con il SSD oggetto del bando. L'impact factor medio delle pubblicazioni presentate è di 3,42 e l'impatto nella comunità di riferimento è testimoniato dal buon numero di citazioni ricevute. In 5 delle 12 pubblicazioni il candidato risulta primo autore, mentre per le altre pubblicazioni l'apporto individuale del candidato è stato giudicato in base alla coerenza del lavoro con l'attività scientifica complessiva.

GIUDIZIO: Riferendosi ai criteri individuati nel verbale n.1, dopo un attento esame delle prime 12 pubblicazioni fra quelle presentate dal candidato, il giudizio è molto buono.

PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

DESCRIZIONE: La produzione scientifica prodotta dal candidato comprende 18 pubblicazioni su riviste internazionali, indicizzate sulle principali banche dati internazionali. Alcune delle riviste sono caratterizzate da impact factor elevati. Buono il numero complessivo di citazioni pari a 145 e il valore dell'h-index di 7.

GIUDIZIO La produzione scientifica del candidato risulta di buon livello e congruente con il SSD CHIM/03 e/o con l'impegno scientifico previsto dal bando. Sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, il giudizio è molto buono.

GIUDIZIO COMPLESSIVO

Dell'analisi dei titoli, del curriculum, dei lavori presentati per la valutazione e della produzione scientifica complessiva, sulla base dei criteri indicati nel verbale n. 1, la presente commissione esprime un giudizio complessivamente molto buono.

PROCEDURA COMPARATIVA PER LA CHIAMATA DI N. 1 POSTO DI RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO A TEMPO PIENO - AI SENSI DELL'ART. 24 CO. 3 LETT. A) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240 - S.C.: 03/B1 – FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI - S.S.D.: CHIM/03 – CHIMICA GENERALE E INORGANICA - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI _____ (BANDITA CON D.R. N. 1114/2021 PROT. N. 65536 - DEL 02/09/2021 AVVISO G.U. N. 75 DEL 21/09/2021)

DICHIARAZIONE

IL SOTTOSCRITTO PROF. Savino Longo, MEMBRO DELLA COMMISSIONE

DICHIARA CON LA PRESENTE DI AVER PARTECIPATO, IN VIA TELEMATICA A MEZZO DEL PROPRIO ACCOUNT E-MAIL: savino.longo@uniba.it, ALLA DEFINIZIONE DEI CRITERI DI MASSIMA PER LA VALUTAZIONE DEI CANDIDATI PER LA SUDETTA PROCEDURA E DI CONCORDARE CON IL VERBALE A FIRMA DEL PROF. NADIA BALUCANI, SEGRETARIO DELLA COMMISSIONE GIUDICATRICE.

IL SOTTOSCRITTO DICHIARA ALTRESI' DI ALLEGARE COPIA DEL PROPRIO DOCUMENTO DI IDENTITA'.

IN FEDE

DATA ____22 Febbraio 2022____

Allegare copia scansionata del proprio documento di identità in corso di validità

PROCEDURA COMPARATIVA PER LA CHIAMATA DI N. 1 POSTO DI RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO A TEMPO PIENO - AI SENSI DELL'ART. 24 CO. 3 LETT. A) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240 - S.C.: 03/B1 - FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI - S.S.D.: CHIM/03 - CHIMICA GENERALE E INORGANICA - PRESSO IL DIPARTIMENTO DI _____ (BANDITA CON D.R. N. 1114/2021 PROT. N. 65536 - DEL 02/09/2021 AVVISO G.U. N. 75 DEL 21/09/2021).

DICHIARAZIONE

IL SOTTOSCRITTO PROF. ALESSANDRO CASELLI, MEMBRO DELLA COMMISSIONE

DICHIARA CON LA PRESENTE DI AVER PARTECIPATO, IN VIA TELEMATICA A MEZZO DEL PROPRIO ACCOUNT E-MAIL: alessandro.caselli@unimi.it, ALLA DEFINIZIONE DEI CRITERI DI MASSIMA PER LA VALUTAZIONE DEI CANDIDATI PER LA SUDETTA PROCEDURA E DI CONCORDARE CON IL VERBALE A FIRMA DEL PROF. NADIA BALUCANI, SEGRETARIO DELLA COMMISSIONE GIUDICATRICE.

IL SOTTOSCRITTO DICHIARA ALTRESI' DI ALLEGARE COPIA DEL PROPRIO DOCUMENTO DI IDENTITA'.

IN FEDE

DATA 22/02/2022



CV - Roberto Paciotti

Nome e cognome: Roberto Paciotti
Data e luogo di nascita: [REDACTED]
Residenza: [REDACTED]
Telefono/cellulare: [REDACTED]
email: [REDACTED]
contatto Skype: [REDACTED]

Attività di ricerca e formazione accademica

1 luglio 2020 – 30 giugno 2021: Assegnista di Ricerca, presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, sul tema "*Studio computazionale della struttura elettronica, del meccanismo di reazione e di spettri IR di complessi di platino ed oro di interesse farmaceutico*", SC 03/B1 - SSD CHIM/03.

1 settembre 2019 – 30 giugno 2020: Borsista di Ricerca, presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, sul tema "*Studio teorico di spettri infrarossi per molecole di interesse biologico contenente metalli*",

16 luglio 2018 – 15 luglio 2019: Assegnista di Ricerca, presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, sul tema "*Studio computazionale di spettri IR di complessi metallici di interesse farmaceutico in fase gassosa*", SC 03/B1 - SSD CHIM/03.

giugno 2017 – maggio 2018: Borsista di Ricerca, presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, sul tema "*Studio computazionale di spettri IR di complessi metallici di interesse farmaceutico in fase gassosa*".

gennaio 2013 – dicembre 2015: Dottorando di ricerca in Scienze del Farmaco presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara.

Il 24 Marzo 2016 ho conseguito il titolo di Dottore di Ricerca Europaeus in Scienze del Farmaco, con tesi dal titolo "*QM and MM calculations on biological systems: from model molecules to proteins*", tutor Prof. Nazzareno Re.

settembre - dicembre 2013: "*Visiting PhD student*" presso *German Research School for Simulation Sciences*, Juelich-Forschungszentrum (Germania), sotto la supervisione del Prof. Paolo Carloni.

aprile 2012 – dicembre 2012: Borsista di Ricerca, presso il Dipartimento di Farmacia, Università degli Studi "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara, sul tema "*Simulazione di spettri IR in fase gas di molecole di interesse farmaceutico con tecniche di calcolo altamente accurate*".

ottobre 2010: Ho conseguito la laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, con votazione di *110/110 con lode*, presso l'Università degli Studi "La Sapienza" di Roma, il 27/10/2010, con tesi sperimentale dal titolo "*Interazione di NO con Gruppi Eme: Caratteristiche Spettroscopiche e Strutturali*", relatrice Prof.ssa Maria Elisa Crestoni.

gennaio – luglio 2010: Ho svolto gran parte delle attività di ricerca per la tesi sperimentale presso il Laboratoire de Chimie Physique, Università di Parigi-Sud XI, Francia, sotto la supervisione del Prof. Philippe Maître.

Altre esperienze lavorative e formative

- *Farmacista tirocinante* presso Farmacia D'Eramo, Avezzano (AQ) (luglio 2016 – dicembre 2016).

- “*Batch record review and batch disposition specialist*” presso Patheon Italia Spa (FR) (febbraio 2016 – giugno 2016).
Inserito all'interno del reparto di Quality Assurance Compliance, ho svolto le seguenti attività: batch record review di prodotti liquidi e liofilizzati sterili; rilascio di lotti al termine del processo di revisione tramite SAP; apertura di deviazioni tramite il sistema TrackWise durante le attività di revisione.
- Stage di 1 anno presso l'azienda BSP Pharmaceuticals (LT) nel reparto di *Quality Assurance* (marzo 2011 - febbraio 2012).
Le mansioni svolte e le esperienze acquisite sono state: batch record review di prodotti iniettabili e solidi orali; rilascio di lotti al termine del processo di revisione tramite SAP; aggiornamento di Master Batch Record di prodotti iniettabili e solidi orali.

Attività scientifica e interessi di ricerca

L'attività scientifica da me svolta ha riguardato i seguenti argomenti:

- Studio computazionale della reattività e di spettri IR di molecole di interesse farmaceutico in fase gas. In particolare, utilizzando diversi livelli di teoria, come *Density Functional Theory* (DFT) e metodi post-Hartree-Fock (*second order Møller-Plesset Perturbation Theory, MP2*), unitamente ad estesi set di base (*basis set*), è stato possibile calcolare le frequenze IR con elevata accuratezza, limitando l'impatto dell'uso dei fattori di scala (*scaling factors*). Utilizzando poi la *Vibrational Second-Order Perturbation Theory* (VPT2) è stato possibile calcolare le frequenze anarmoniche incrementando ulteriormente l'accuratezza della previsione teorica. Tale approccio teorico è stato applicato quindi per determinare le proprietà spettroscopiche e strutturali della O-solfo-serina (*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 25891-25904) e di complessi monodentati e bidentati del platino(II) con aminoacidi o mimetici di nucleofili biologici (*J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **2021**, *32*, 2206–2217; *Pure Appl. Chem.* **2020**, *92*(1), 3–13; *Int. J. Mass. Spectrom.* **2019**, *435*, 7-17; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2017**, *19*, 26697-26707; *J. Inorg. Biochem.* **2020**, *209*, 111096). Le frequenze teoriche sono state utilizzate per interpretare gli spettri sperimentali ottenuti in gas phase mediante spettroscopia *IR multiphoton dissociation* (IRMPD spectroscopy) e per individuare le strutture molecolari ad essi associate.
- L'interazione proteina-proteina è un fenomeno di grande rilevanza in moltissimi processi biologici e patologici. Mediante la tecnica di calcolo *ab initio Fragment Molecular Approach* (FMO), sono stati valutati: i) gli effetti prodotti della presenza di ioni Ca^{2+} e della mutazione E200K sulla struttura terziaria e sul potenziale elettrostatico della proteina prionica, PrP (*Proteins* **2015**, *83*: 1751–1765) e ii) il processo e le modalità di aggregazione del mutante PrP-E200K. Nel dettaglio, è stato costruito il dimero del mutante E200K, modello delle fasi precoci di aggregazione proteica alla base dei processi neurodegenerativi, e studiato mediante calcoli di *dinamica molecolare* (MD). Successivamente, i diversi conformeri della struttura dimerica sono stati poi sottoposti a calcoli FMO attraverso i quali è stato possibile investigare la variazione delle interazioni inter-/intra-dominio e tra le due unità monomeriche. Ciò ha permesso di elaborare un modello delle fasi iniziali di aggregazione basato sulla complementarità elettrostatica tra i due monomeri (*Proteins* **2019**; *87*: 51-61;) e di individuare piccole molecole come potenziali inibitori del processo di aggregazione (*J. Comput. Aided Mol. Des.* **2021**, *35*:751–770).
Il metodo FMO è stato applicato anche per lo studio dell'interazione tra due importanti proteine, PD-1 (Programmed cell death protein 1) e PD-L1 (Programmed death-ligand 1), e per approfondire il meccanismo di azione di piccole molecole capaci di inibire la formazione del complesso PD-1/PD-L1 (*J. Comput. Aided Mol. Des.* **2020**, *34*:897–914).
- Utilizzo di tecniche di *molecular docking* per determinare l'affinità di legame tra specifici ligandi e metalloenzimi, come ossido nitrico sintasi (NOS, contenente Fe^{2+}), ciclossigenasi

(COX-2, contenente Fe²⁺) e anidraasi carbonica (CA, contenente Zn²⁺). Lo studio teorico ha permesso di interpretare i dati sperimentali di affinità (IC₅₀, K_i) fornendo importanti informazioni sulla relazione struttura-attività (SAR) dei ligandi studiati (*Antioxidants* **2021**, *10*(1), 56; *ACS Med. Chem. Lett.*, **2015**, *6* (6), 635–640; *ChemistrySelect* **2016**, *1*, 5479; *Current Enzyme Inhibition*, **2016** *12*(999):1-1;).

Nel periodo di permanenza in Germania, presso i laboratori del Prof. Paolo Carloni, mi sono concentrato sulla seguente attività di ricerca:

- caratterizzazione spettroscopica (IR e ¹H NMR) di oligopeptidi e singoli aminoacidi in soluzione, mediante calcoli di dinamica *ab initio* (Car-Parrinello) e dinamica classica.

Interessi di ricerca:

Le tematiche di ricerca che mi piacerebbe sviluppare sono le seguenti:

- Applicazione del metodo FMO e MD per lo studio di complessi metallici intercalanti del DNA G-quadruplex e ad attività nucleasica (*artificial metallonucleases*) come potenziali agenti antitumorali.
- Applicazione del metodo FMO e di tecniche di machine learning/data mining per la derivazione di una funzione di score capace di stimare con elevata accuratezza l'affinità di legame tra recettori proteici e piccole molecole;
- Studio mediante tecniche computazionali delle proprietà strutturali e della reattività di complessi metallici contenenti il centro dicobalto(0)-esacarbonilico (Co₂(CO)₆, dicobalt(0)hexacarbonilic, DHC), capaci di rilasciare molecole di CO (CO-RMs, *CO releasing molecules*). Questa classe di molecole risulta particolarmente interessante poiché rappresenta un modo sicuro di veicolare a scopo terapeutico il monossido di carbonio direttamente nei tessuti bersaglio (azione antinfiammatoria e antitumorale).

Produzione scientifica complessiva

La mia produzione scientifica, nel periodo 2015-2021, è descritta dai seguenti parametri ottenuti consultando la banca dati Scopus (www.scopus.com):

- **Consistenza della produzione scientifica complessiva**
Numero totale di pubblicazioni nel periodo 2015-2021: 17
- **Intensità della produzione scientifica complessiva**
Numero medio di pubblicazioni per anno nel periodo 2015-2021: 2.83
- **Continuità della produzione scientifica complessiva**
numero anni continuativi della produzione scientifica nel periodo 2015-2021: 6
- **Altri parametri**
h-index: 7
numero totale di citazioni: 145

Di seguito, l'elenco delle pubblicazioni scientifiche nello stesso ordine con cui sono state caricate nella sezione "Le tue Pubblicazioni" della domanda presentata con procedura informatizzata. Ciascuna pubblicazione è corredata di impact factor della rivista (IF), numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione, numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione, anni decorsi dall'anno di pubblicazione e la descrizione del mio contributo. La presenza dell'asterisco (*) indica che ho svolto il ruolo di *corresponding author*.

1. R. Paciotti, C. Coletti, N. Re, D. Scuderi, B. Chiavarino, S. Fornarini, M. E. Crestoni **Serine O-sulfation probed by IRMPD spectroscopy**, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*(39), 25891-25904. doi: 10.1039/C5CP01409C ISSN: 14639076

IF: 4.449;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 29

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 4.83

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 6

contributo: ho eseguito lo studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR) e l'analisi dei risultati corrispondenti. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

2. R. Paciotti, D. Corinti, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C. Coletti, N. Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19(39), 26697-26707.
doi: 10.1039/C7CP05203K ISSN: 14639076

IF: 3.906;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 21

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 5.25

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 4

contributo: ho eseguito lo studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR) e l'analisi dei risultati corrispondenti. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

3. D. Corinti, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maitre, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy** *Int. J. Mass. Spectrom.* **2019**, 435, pp. 7-17.
doi: 10.1016/j.ijms.2018.10.012 ISSN: 13873806

IF: 2.090;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 10

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 5

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 2

contributo: ho contribuito alla realizzazione dello studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR, studio dello stato di transizione) e all'analisi dei risultati corrispondenti. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

4. I. Tolbatov, T. Marzo, D. Cirri, C. Gabbiani, C. Coletti, A. Marrone, R. Paciotti, L. Messori, N. Re **Reactions of cisplatin and cis-[PtI₂(NH₃)₂] with molecular models of relevant protein sidechains: A comparative analysis** *J. Inorg. Biochem.* **2020**, 209, 111096, pp. 1-9.
doi: 10.1016/j.jinorgbio.2020.111096 ISSN: 01620134

IF: 3.212;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 7

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 7

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 1

contributo: ho contribuito ad eseguire lo studio computazionale (ottimizzazione di geometria e studio degli stati di transizione) e ad analizzare i corrispondenti risultati. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

5. R. Paciotti, D. Corinti, P. Maitre, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **From Preassociation to Chelation: A Survey of Cisplatin Interaction with Methionine at Molecular Level by IR Ion Spectroscopy and Computations** *J. Am. Soc.*

Mass Spectrom. **2021**, 32(8), pp. 2206–2217.
doi: 10.1021/jasms.1c00152 ISSN: 10440305

IF: 3.109 (riferito all'anno 2020);

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 0

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 0

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 0

contributo: ho effettuato lo studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR, studio dello stato di transizione) e analisi dei risultati corrispondenti. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

6. D. Corinti, R. Paciotti, N. Re, C. Coletti, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **Binding motifs of cisplatin interaction with simple biomolecules and aminoacid targets probed by IR ion spectroscopy** *Pure Appl. Chem.* **2020**, 92(1), pp. 3–13.
doi: 10.1515/pac-2019-0110 ISSN: 00334545

IF: 1.919 ;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 3

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 3

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 1

contributo: ho contribuito alla stesura del manoscritto.

7. R. Paciotti*, M. Agamennone, C. Coletti, Lorian Storchi **Characterization of PD-L1 binding sites by a combined FMO/GRID-DRY approach** *J. Comput. Aided Mol. Des.* **2020**, 34 (8), pp. 897–914. doi: 10.1007/s10822-020-00306-0 ISSN: 0920654X

IF: 3.686;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 2

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 2

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 1

contributo: ho eseguito lo studio computazionale utilizzando il metodo *ab initio* Fragment Molecular Orbital (FMO) e l'analisi dei corrispondenti risultati. Sono stato il principale contributore alla stesura del manoscritto. Ho svolto il ruolo di *corresponding author*.

8. E. Berrino, S. Carradori, A. Angeli, F. Carta, C. T. Supuran, P. Guglielmi, C. Coletti, R. Paciotti, H. Schweikl, F. Maestrelli, E. Cerbai, M. Gallorini **Dual Carbonic Anhydrase IX/XII Inhibitors and Carbon Monoxide Releasing Molecules Modulate LPS-Mediated Inflammation in Mouse Macrophages** *Antioxidants* **2021**, 10(1), pp. 1-24, 56.
doi: 10.3390/antiox10010056 ISSN: 20763921

IF: 6.312 (riferito all'anno 2020);

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 6

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 6

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 0

contributo: ho eseguito i calcoli di molecular docking e di ottimizzazione dei complessi ligando-recettore utilizzando il metodo DFTB e analizzato i corrispondenti risultati. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

9. M. Agamennone, L. Storchi, A. Marrone, R. Paciotti* **Hampering the early aggregation of**

PrP-E200K protein by charge-based inhibitors: a computational study *J. Comput. Aided Mol. Des.* **2021**, 35(6), pp. 751–770. doi: 10.1007/s10822-021-00393-7 ISSN: 0920654X

IF: 3.686 (riferito all'anno 2020);

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 0

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 0

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 0

contributo: ho eseguito i calcoli di dinamica molecolare dei complessi ligando-recettore e analisi dei risultati corrispondenti. Sono stato il principale contributore alla stesura del manoscritto. Ho svolto il ruolo di *corresponding author*.

10. R. Paciotti, L. Storchi, A. Marrone **An insight of early PrP-E200K aggregation by combined molecular dynamics/fragment molecular orbital approaches** *Proteins* **2019**; 87(1), pp. 51-61. doi: 10.1002/prot.25621 ISSN: 08873585

IF: 2.828;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 4

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 2

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 2

contributo: ho eseguito lo studio computazionale utilizzando il metodo *ab initio* Fragment Molecular Orbital (FMO) e l'analisi dei corrispondenti risultati. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

11. C. Maccallini, M. Montagnani, R. Paciotti, A. Ammazalorso, B. De Filippis, M. Di Matteo, S. Di Silvestre, M. Fantacuzzi, L. Giampietro, M. A. Potenza, N. Re, A. Pandolfi, R. Amoroso **Selective Acetamidine-Based Nitric Oxide Synthase Inhibitors: Synthesis, Docking, and Biological Studies** *ACS Med. Chem. Lett.* **2015**, 6(6), pp. 635–640. doi: 10.1021/acsmchemlett.5b00149 ISSN: 19485875

IF: 3.355;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 25

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 4.17

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 6

contributo: ho eseguito lo studio di molecular docking e l'analisi dei risultati corrispondenti. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

12. L. Storchi, R. Paciotti, N. Re, A. Marrone **Investigation of the molecular similarity in closely related protein systems: The PrP case study** *Proteins* **2015**, 83(10), pp. 1751–1765. doi: 10.1002/prot.24836 ISSN: 08873585

IF: 2.499;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 7

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 1.17

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 6

contributo: ho eseguito lo studio computazionale utilizzando il metodo *ab initio* Fragment Molecular Orbital (FMO) e l'analisi dei corrispondenti risultati. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

13. **R. Paciotti**, I. Tolbatov, V. Graziani, A. Marrone, N. Re, C. Coletti **Insights on the activity of platinum-based anticancer complexes through computational methods** *AIP Conf. Proc.* **2018**, 2040, 020019-1-020019-4. doi: 10.1063/1.5079061 ISSN: 0094243X
- IF: -;*
numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 10
numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 3.33
anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 3
contributo: ho contribuito alla stesura del manoscritto.
14. N. Re, M. Fantacuzzi, C. Maccallini, **R. Paciotti**, R. Amoroso **Recent Developments of Amidine-like Compounds as Selective NOS Inhibitors** *Current Enzyme Inhibition* **2016**, 12(1), pp. 30-39. doi: 10.2174/1573408012999151109100557 ISSN: 15734080
- IF: 0.33;*
numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 13
numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 2.60
anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 5
contributo: ho contribuito alla stesura del manoscritto.
15. **R. Paciotti**, I. Tolbatov, A. Marrone, L. Storchi, N. Re, C. Coletti **Computational Investigations of Bioinorganic Complexes: The Case of Calcium, Gold and Platinum Ions** *AIP Conf. Proc.* **2019**, 2186, pp. 030011-1-030011-4. doi: 10.1063/1.5137922 ISSN: 0094243X
- IF: -;*
numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 5
numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 2.50
anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 2
contributo: ho contribuito alla stesura del manoscritto.
16. C. Coletti, D. Corinti, **R. Paciotti**, N. Re, M. E. Crestoni, S. Fomarini **Structure and dynamics of gas phase ions: Interplay between experiments and computations in IRMPD spectroscopy** *AIP Conf. Proc.* **2017**, 1906(1), 030011-1-030011-4. doi: 10.1063/1.5012290 ISSN: 0094243X
- F: -;*
numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 1
numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 0.25
anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 4
contributo: ho contribuito alla stesura del manoscritto.
17. S. Genovese, S. Fiorito, V. A. Taddeo, F. Epifano, **R. Paciotti**, C. Coletti, S. Franceschelli, L. Speranza, A. Ferrone, M. Felaco, A. Patruno **Effects of geranyloxycinnamic acids on COX-2 and iNOS functionalities in LPS-stimulated U937 mononuclear cells** *ChemistrySelect* **2016**, 1(17), 5479-5486. doi: 10.1002/slct.201601091 ISSN: 23656549
- IF: 1.505 (riferito al 2017, primo disponibile);*
numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 2
numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 0.40
anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 5

contributo: ho eseguito lo studio di molecular docking e l'analisi dei risultati corrispondenti. Ho contribuito alla stesura del manoscritto.

18. I. Tolbatov, A. Marrone, R. Paciotti, N. Re, C. Coletti **Multilayered Modelling of the Metallation of Biological Targets** (2021) In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. ICCSA 2021. Lecture Notes in Computer Science, vol 12958. Springer, Cham. doi: 10.1007/978-3-030-87016-4_30 ISSN: 0302-9743
Nota: questa pubblicazione non è stata ancora indicizzata nella banca dati Scopus.

IF: - ;

numero totale di citazioni dall'anno di pubblicazione: 0

numero medio di citazione dall'anno di pubblicazione: 0

anni decorsi dall'anno di pubblicazione: 0

contributo: ho contribuito alla stesura del manoscritto.

Altri titoli conseguiti

Di seguito l'elenco degli altri titoli da me conseguiti, riportati nello stesso ordine con cui sono stati caricati nella sezione "Altri Titoli e brevetti" della domanda inviata con procedura informatizzata:

- "Introduction to Deep Learning and TensorFlow", presso la sede CINECA di Roma (18 - 20 novembre 2019).
Questo corso è stata un'introduzione al deep learning, dove ho acquisito i concetti di base del machine learning e delle sue possibili applicazioni. Il corso si è concentrato anche su sessioni pratiche dedicate all'introduzione del framework TensorFlow, ampiamente utilizzato in ambito deep learning.
- "Introduction to scientific and technical computing in C", presso la sede CINECA di Roma (22 - 24 ottobre 2018).
In questo corso ho appreso i concetti di base del linguaggio C, con particolare attenzione al moderno stile di programmazione per applicazioni scientifiche e per ambienti *high performance computing* (HPC).
- "Statistica di base per la ricerca scientifica", presso l'Università Cattolica del Sacro Cuore di Roma (07 - 09 settembre 2015).
In questo corso ho approfondito e rivisto gli aspetti fondamentali della statistica descrittiva e inferenziale, con particolare focus sulle applicazioni in ambito scientifico.
- "Methods in Molecular Simulation Summer School 2013", presso l'Università di Manchester (21 - 30 luglio 2013).
In questa scuola estiva ho approfondito i concetti di base di importanti metodi di calcolo come dinamica molecolare (MD) e Monte Carlo, con particolare riguardo alle applicazioni per lo studio di sistemi biologici (proteine).
- "Psi-k Summer School on Ab Initio Molecular Dynamics for Biomolecules", presso Santo Stefano di Sessanio (09 - 14 giugno 2013).
In questa scuola estiva ho acquisito i concetti di base della dinamica *ab initio* (Car-Parrinello) e del metodo QM/MM, con particolare focus sui sistemi biologici (proteine e metallo-enzimi).
- "Writing Across Science", Scuola Superiore "G. d'Annunzio" (Chieti, 23 giugno - 4 luglio 2014).
Corso di scrittura scientifica per dottorandi di ricerca.
- Attestato di conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca in "Scienze del Farmaco" con certificazione aggiuntiva di Doctor Europaeus, rilasciato dall'Università degli Studi "G.

D'Annunzio" Chieti-Pescara.

Partecipazione a congressi

- Partecipazione al 2° Workshop "Metodi Computazionali per Processi Chimici e Biochimici – Vignale Monferrato (AL), 22-25 maggio 2012".
- Partecipazione al "12° Sigma Aldrich Young Chemists Symposium (12° S.A.Y.C.S.)", Riccione (RN), 1-3 ottobre 2012.
- Partecipazione al "Winter Modeling 2014 Special Edition: Computational Spectroscopy for molecules in gas and condensed phase", Pisa, Scuola Normale Superiore, 1-2 dicembre 2014.

Competenze tecniche

- ottima conoscenza del metodo *ab initio* Fragment Molecular Orbital (FMO);
- ottima conoscenza dei software di calcolo Gaussian, GAMESS-US e Jaguar;
- buona conoscenza di del software Gromacs per calcoli di dinamica classica (MD);
- buona conoscenza del software CPMD per calcoli di dinamica *ab initio* (Car-Parrinello);
- ottima conoscenza del software per eseguire calcoli di docking Glide (Schrodinger);
- ottima conoscenza dei software Ligprep, e Protein Preparation Wizard (Schrodinger);
- ottima conoscenza del software SiteMap per l'identificazione di siti di legame (Schrodinger);
- ottima conoscenza del tool Prime MM/GBSA (Schrodinger);
- buone capacità di programmazione in bash scripting, Python e Javascript;
- buone capacità di analisi dei dati, anche attraverso l'elaborazione di script *ad hoc*;
- conoscenza di base dei seguenti linguaggi di programmazione: C e Fortran77;
- conoscenza di base della libreria TensorFlow per il machine learning;
- consolidata esperienza nell'utilizzo di software di calcolo in ambiente *high performance computing* (HPC);
- buona conoscenza del software di elaborazione grafica VMD, Maestro, Pymol e Avogadro;
- buona conoscenza dei sistemi operativi Windows 7 e Linux (Ubuntu);
- ottima conoscenza del pacchetto Microsoft Office: Word, Excel e PowerPoint.

Conoscenza delle lingue

- Buona conoscenza della lingua inglese, scritta e parlata.

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali presenti nel cv ai sensi dell'art. 13 del Decreto Legislativo 30 giugno 2003, n. 196 "Codice in materia di protezione dei dati personali" e dell'art. 13 del GDPR (Regolamento UE 2016/679).

Data 05/10/2021

CV Roberto Paciotti



ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI INDICATE DAL CANDIDATO

Paciotti Roberto

- Cod. Progr.:** 1
- Tipologia:** Articolo su rivista scientifica
- Titolo dell'articolo:** Serine O-sulfation probed by IRMPD spectroscopy
- Titolo della rivista:** Physical Chemistry Chemical Physics
- Volume:** 17
- Autori:** R. Paciotti, C. Coletti, N. Re, D. Scuderi, B. Chiavarino, S. Fornarini, M. E. Crestoni
- Anno:** 2015
- ISSN:** 14639076
- DOI:** 10.1039/c5cp01409c
- Pagina iniziale:** 25891
- Pagina finale:** 25904
- Contributo del candidato:** Esecuzione dello studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR) e dell'analisi dei risultati corrispondenti. Contribuzione alla stesura del manoscritto.
- Impact Factor (IF):** 4.449 - riferito all'anno della pubblicazione
- Citazioni:** 29
- Anni decorsi:** 6
- Media citazioni/anno:** 4.83
- Banca dati:** Scopus
- Nome del file caricato:** Phys-Chem-Chem-Phys_2015_17_25891-25904.pdf (3 Mb)
- Cod. Progr.:** 2
- Tipologia:** Articolo su rivista scientifica
- Titolo dell'articolo:** Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes
- Titolo della rivista:** Physical Chemistry Chemical Physics
- Volume:** 19
- Autori:** R. Paciotti, D. Corinti, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C. Coletti, N.



Università degli Studi Gabriele d'Annunzio - Chieti Pescara
Procedure Pubbliche di Selezione - Sistema per la gestione delle candidature

PROCEDURA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO - TIPOLOGIA A
CHIM/03 - dipartimento di FARMACIA - DR 1114/2021 prot. 85536 del 02/09/2021

Candidato: Roberto Paciotti

Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini

Anno: 2017

ISSN: 14639076

DOI: 10.1039/c7cp05203k

Pagina iniziale: 26697

Pagina finale: 26707

Contributo del candidato: Esecuzione dello studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR) e dell'analisi dei risultati corrispondenti. Contribuzione alla stesura del manoscritto.

Impact Factor (IF): 3.906 - riferito all'anno della pubblicazione

Citazioni: 21

Anni decorsi: 4

Media citazioni/anno: 5.25

Banca dati: Scopus

Nome del file caricato: Phys-Chem-Chem-Phys_2017_19_26697-26707.pdf (2.5 Mb)

Cod. Progr.: 3

Tipologia: Articolo su rivista scientifica

Titolo dell'articolo: Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy

Titolo della rivista: International Journal of Mass Spectrometry

Volume: 435

Autori: D. Corinti, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maitre, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini

Anno: 2019

ISSN: 13873806

DOI: 10.1016/j.ijms.2018.10.012

Pagina iniziale: 7

Pagina finale: 17

Contributo del candidato: Contribuzione alla realizzazione dello studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR, studio dello stato di transizione) e dell'analisi dei risultati corrispondenti. Contribuzione alla stesura del manoscritto.

Questo documento è stato stampato da Roberto Paciotti



Impact Factor (IF): 2.09 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 10
Anni decorsi: 2
Media citazioni/anno: 5
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: Int-J-Mass-Spectrom_2019_435_7-17.pdf (2.7 Mb)

Cod. Progr.: 4
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Reactions of cisplatin and cis-[PtI2(NH3)2] with molecular models of relevant protein sidechains: A comparative analysis
Titolo della rivista: Journal of Inorganic Biochemistry
Volume: 209
Autori: I. Tolbatov, T. Marzo, D. Cirri, C. Gabbiani, C. Coletti, A. Marrone, R. Paciotti, L. Messori, N. Re
Anno: 2020
ISSN: 01620134
DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2020.111096
Pagina iniziale: 1
Pagina finale: 9
Contributo del candidato: Contribuzione all'esecuzione dello studio computazionale (ottimizzazione di geometria e studio degli stati di transizione) e all'analisi dei corrispondenti risultati. Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Impact Factor (IF): 3.212 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 7
Anni decorsi: 1
Media citazioni/anno: 7
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: J-Inorg-Biochem_2020_209_111096_1-9.pdf (1.8 Mb)
Cod. Progr.: 5
Tipologia: Articolo su rivista scientifica



Titolo dell'articolo: From Preassociation to Chelation: A Survey of Cisplatin Interaction with Methionine at Molecular Level by IR Ion Spectroscopy and Computations

Titolo della rivista: Journal of the American Society for Mass Spectrometry

Volume: 32

Autori: R. Paciotti, D. Corinti, P. Maître, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini

Anno: 2021

ISSN: 10440305

DOI: 10.1021/jasms.1c00152

Pagina iniziale: 2206

Pagina finale: 2217

Contributo del candidato: Esecuzione dello studio computazionale (ottimizzazione di geometria, simulazione di spettri IR, studio dello stato di transizione) e dell'analisi dei risultati corrispondenti. Contribuzione alla stesura del manoscritto.

Altre informazioni: L'impact factor (IF) della rivista è riferito all'anno 2020.

Impact Factor (IF): 3.109 - vedi il campo 'altre informazioni'

Citazioni: 0

Anni decorsi: 0

Media citazioni/anno: 0

Banca dati: Scopus

Nome del file caricato: J-Am-Soc-Mass-Spectrom_2021_32_2206-2217.pdf (3.2 Mb)

Cod. Progr.: 6

Tipologia: Articolo su rivista scientifica

Titolo dell'articolo: Binding motifs of cisplatin interaction with simple biomolecules and aminoacid targets probed by IR ion spectroscopy

Titolo della rivista: Pure and Applied Chemistry

Volume: 92

Autori: D. Corinti, R. Paciotti, N. Re, C. Coletti, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini

Anno: 2020

ISSN: 00334545

DOI: 10.1515/pac-2019-0110



Università degli Studi Gabriele d'Annunzio - Chieti Pescara
Procedure Pubbliche di Selezione - Sistema per la gestione delle candidature

PROCEDURA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO - TIPOLOGIA A
CHIM/03 - dipartimento di FARMACIA - DR 1114/2021 prot. 66636 del 02/09/2021

Candidato: Roberto Paciotti

Pagina iniziale: 3
Pagina finale: 13
Contributo del candidato: Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Impact Factor (IF): 1.919 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 3
Anni decorsi: 1
Media citazioni/anno: 3
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: Pure-Appl-Chem_2020_92_3-13.pdf (3.5 Mb)

Cod. Progr.: 7
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Characterization of PD-L1 binding sites by a combined FMO/GRID-DRY approach
Titolo della rivista: Journal of Computer-Aided Molecular Design
Volume: 34
Autori: R. Paciotti, M. Agamennone, C. Coletti, Lorian Stocchi
Anno: 2020
ISSN: 0920654X
DOI: 10.1007/s10822-020-00306-0
Pagina iniziale: 897
Pagina finale: 914
Contributo del candidato: Esecuzione dello studio computazionale utilizzando il metodo ab initio Fragment Molecular Orbital (FMO) e dell'analisi dei corrispondenti risultati. Stesura di gran parte del manoscritto. Ruolo di corresponding author.
Impact Factor (IF): 3.686 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 2
Anni decorsi: 1
Media citazioni/anno: 2
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: J-Comput-Aided-Mol-Des_2020_34_897-914.pdf (1.9 Mb)

Questo documento è stato stampato da Roberto Paciotti



Università degli Studi Gabriele d'Annunzio - Chieti Pescara
Procedure Pubbliche di Selezione - Sistema per la gestione delle candidature

PROCEDURA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO - TIPOLOGIA A
CHIM/03 - dipartimento di FARMACIA - DR 1114/2021 prot. 65536 del 02/09/2021

Candidato: Roberto Paciotti

Cod. Progr.: 8
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Dual Carbonic Anhydrase IX/XII Inhibitors and Carbon Monoxide Releasing Molecules Modulate LPS-Mediated
Titolo della rivista: Antioxidants
Volume: 10
Autori: E. Berrino, S. Carradori, A. Angeli, F. Carta, C. T. Supuran, P. Guglielmi, C. Coletti, R. Paciotti, H. Schweiki, F. Maestrelli, E. Cerbai, M. Gallorini
Anno: 2021
ISSN: 20763921
DOI: 10.3390/antiox10010056
Pagina iniziale: 1
Pagina finale: 24
Contributo del candidato: Esecuzione dei calcoli di molecular docking e di ottimizzazione dei complessi ligando-recettore utilizzando il metodo DFTB ed analisi dei corrispondenti risultati. Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Altre informazioni: L'impact factor (IF) della rivista si riferisce all'anno 2020.
Impact Factor (IF): 6.312 - vedi il campo 'altre informazioni'
Citazioni: 6
Anni decorsi: 0
Media citazioni/anno: 6
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: Antioxidants_2021_10_56_1-24.pdf (2.5 Mb)

Cod. Progr.: 9
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Hampering the early aggregation of PrP-E200K protein by charge-based inhibitors: a computational study
Titolo della rivista: Journal of Computer-Aided Molecular Design,
Volume: 35
Autori: M. Agamennone, L. Storchì, A. Marrone, R. Paciotti
Anno: 2021

Questo documento è stato stampato da Roberto Paciotti



ISSN: 0920654X
DOI: 10.1007/s10822-021-00393-7
Pagina iniziale: 751
Pagina finale: 770
Contributo del candidato: Esecuzione dei calcoli di dinamica molecolare dei complessi ligando-recettore e dell'analisi dei risultati corrispondenti. Stesura di gran parte del manoscritto. Ruolo di corresponding author.
Altre informazioni: L'impact factor (IF) della rivista è riferito all'anno 2020.
Impact Factor (IF): 3.686 - vedi il campo 'altre informazioni'
Citazioni: 0
Anni decorsi: 0
Media citazioni/anno: 0
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: J-Comput-Aided-Mol-Des_2021_35_751-770.pdf (2 Mb)

Cod. Progr.: 10
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: An insight of early PrP-E200K aggregation by combined molecular dynamics/fragment molecular orbital approaches
Titolo della rivista: Proteins: Structure, Function and Bioinformatics
Volume: 87
Autori: R. Paciotti, L. Storchi, A. Marrone
Anno: 2019
ISSN: 08873585
DOI: 10.1002/prot.25621
Pagina iniziale: 51
Pagina finale: 61
Contributo del candidato: Esecuzione dello studio computazionale, utilizzando il metodo ab initio Fragment Molecular Orbital (FMO), e dell'analisi dei corrispondenti risultati. Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Impact Factor (IF): 2.828 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 4



Università degli Studi Gabriele d'Annunzio - Chieti Pescara
Procedure Pubbliche di Selezione - Sistema per la gestione delle candidature

PROCEDURA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO - TIPOLOGIA A
CHIM/03 - dipartimento di FARMACIA - DR 1114/2021 prot. 65536 del 02/09/2021

Candidato: Roberto Paciotti

Anni decorsi: 2
Media citazioni/anno: 2
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: Proteins_2019_87_51-61.pdf (2.2 Mb)

Cod. Progr.: 11
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Selective Acetamidine-Based Nitric Oxide Synthase Inhibitors: Synthesis, Docking, and Biological Studies
Titolo della rivista: ACS Medicinal Chemistry Letters
Volume: 6
Autori: C. Maccallini, M. Montagnani, R. Paciotti, A. Ammazalorso, B. De Filippis, M. Di Matteo, S. Di Silvestre, M. Fantacuzzi, L. Giampietro, M. A. Potenza, N. Re, A. Pandolfi, R. Amoroso
Anno: 2015
ISSN: 19485875
DOI: 10.1021/acsmmedchemlett.5b00149
Pagina iniziale: 635
Pagina finale: 640
Contributo del candidato: Esecuzione dello studio di molecular docking e dell'analisi dei risultati corrispondenti. Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Impact Factor (IF): 3.355 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 25
Anni decorsi: 6
Media citazioni/anno: 4.17
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: ACS-Med-Chem-Lett_2015_6_635-640.pdf (1.9 Mb)

Cod. Progr.: 12
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Investigation of the molecular similarity in closely related protein systems: The PrP case study
Titolo della rivista: Proteins: Structure, Function and Bioinformatics

Questo documento è stato stampato da Roberto Paciotti



Volume: 83
Autori: L. Storchì, R. Paciotti, N. Re, A. Marrone
Anno: 2015
ISSN: 08873585
DOI: 10.1002/prot.24836
Pagina iniziale: 1751
Pagina finale: 1765
Contributo del candidato: Esecuzione dello studio computazionale utilizzando il metodo ab initio Fragment Molecular Orbital (FMO) e dell'analisi dei corrispondenti risultati. Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Impact Factor (IF): 2.499 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 7
Anni decorsi: 6
Media citazioni/anno: 1.17
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: Proteins_2015_83_1751-1765.pdf (768 Kb)

Cod. Progr.: 13
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Insights on the activity of platinum-based anticancer complexes through computational methods
Titolo della rivista: AIP Conference Proceedings
Volume: 2040
Autori: R. Paciotti, I. Tolbatov, V. Graziani, A. Marrone, N. Re, C. Coletti
Anno: 2018
ISSN: 0094243X
DOI: 10.1063/1.5079061
Pagina iniziale: 020019-1
Pagina finale: 020019-4
Contributo del candidato: Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Altre informazioni: Conference Paper: la rivista non è dotata di impact factor (IF).
Impact Factor (IF): 0 - vedi il campo 'altre informazioni'



Università degli Studi Gabriele d'Annunzio - Chieti Pescara
Procedure Pubbliche di Selezione - Sistema per la gestione delle candidature

PROCEDURA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO - TIPOLOGIA A
CHIM/03 - dipartimento di FARMACIA - DR 1114/2021 prot. 85836 del 02/09/2021

Candidato: **Roberto Paciotti**

Citazioni: 10
Anni decorsi: 3
Media citazioni/anno: 3.33
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: AIP-Conf-Proc_2018_2040_020019-1-020019-4.pdf (596 Kb)

Cod. Progr.: 14
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Recent Developments of Amidine-like Compounds as Selective NOS Inhibitors
Titolo della rivista: Current Enzyme Inhibition
Volume: 12
Autori: N. Re, M. Fantacuzzi, C. Maccallini, R. Paciotti, R. Amoroso
Anno: 2016
ISSN: 15734080
DOI: 10.2174/1573408012999151109100557
Pagina iniziale: 30
Pagina finale: 39
Contributo del candidato: Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Impact Factor (IF): 0.33 - riferito all'anno della pubblicazione
Citazioni: 13
Anni decorsi: 5
Media citazioni/anno: 2.6
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: Curr-Enz-Inhib_2016_12_30-39.pdf (318 Kb)

Cod. Progr.: 15
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Computational Investigations of Bioinorganic Complexes: The Case of Calcium, Gold and Platinum Ions
Titolo della rivista: AIP Conference Proceedings

Questo documento è stato stampato da Roberto Paciotti



Volume: 2186
Autori: R. Paciotti, I. Tolbatov, A. Marrone, L. Storchi, N. Re, C. Coletti
Anno: 2019
ISSN: 978-073541933-9
DOI: 10.1063/1.5137922
Pagina iniziale: 030011-1
Pagina finale: 030011-4
Contributo del candidato: Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Altre informazioni: Conference Paper: La rivista non è dotata di impact factor (IF).
Impact Factor (IF): 0 - vedi il campo 'altre informazioni'
Citazioni: 5
Anni decorsi: 2
Media citazioni/anno: 2.5
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: AIP-Conf-Proc_2019_2186_030011-1-030011-4.pdf (500 Kb)

Cod. Progr.: 16
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Structure and dynamics of gas phase ions: Interplay between experiments and computations in IRMPD spectroscopy
Titolo della rivista: AIP Conference Proceedings
Volume: 1906
Autori: C. Coletti, D. Corinti, R. Paciotti, N. Re, M. E. Crestoni, S. Fornarini
Anno: 2017
ISSN: 0094243X
DOI: 10.1063/1.5012290
Pagina iniziale: 030011-1
Pagina finale: 030011-4
Contributo del candidato: Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Altre informazioni: Conference Paper: La rivista non è dotata di impact factor (IF).
Impact Factor (IF): 0 - vedi il campo 'altre informazioni'



Citazioni: 1
Anni decorsi: 4
Media citazioni/anno: 0.25
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: AIP-Conf-Proc_2017_1906_030011-1-030011-4.pdf (231 Kb)

Cod. Progr.: 17
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Effects of geranyloxycinnamic acids on COX-2 and iNOS functionalities in LPS-stimulated U937 mononuclear cells
Titolo della rivista: ChemistrySelect
Volume: 1
Autori: S. Genovese, S. Fiorito, V. A. Taddeo, F. Epifano, R. Paciotti, C. Coletti, S. Franceschelli, L. Speranza, A. Ferrone, M. Felaco, A. Patruno
Anno: 2016
ISSN: 23656549
DOI: 10.1002/slct.201601091
Pagina iniziale: 5479
Pagina finale: 5486
Contributo del candidato: Esecuzione dello studio di molecular docking e dell'analisi dei risultati corrispondenti. Contribuzione alla stesura del manoscritto.
Impact Factor (IF): 1.505 - riferito al primo anno successivo alla pubblicazione
Citazioni: 2
Anni decorsi: 5
Media citazioni/anno: 0.4
Banca dati: Scopus
Nome del file caricato: ChemistrySelect_2016_1_5479.pdf (712 Kb)

Cod. Progr.: 18
Tipologia: Articolo su rivista scientifica
Titolo dell'articolo: Multilayered Modelling of the Metallation of Biological Targets
Titolo della rivista: Lecture Notes in Computer Science (LNCS) - ICCSA 2021



Università degli Studi Gabriele d'Annunzio - Chieti Pescara
Procedure Pubbliche di Selezione - Sistema per la gestione delle candidature

PROCEDURA PER IL RECLUTAMENTO DI UN RICERCATORE CON RAPPORTO DI LAVORO A TEMPO DETERMINATO - TIPOLOGIA A
CHIM/03 - dipartimento di FARMACIA - DR 1114/2021 prot. 65536 del 02/09/2021

Candidato: Roberto Paciotti

Volume: 12958

Autori: I. Tolbatov, A. Marrone, R. Paciotti, N. Re, C. Coletti

Anno: 2021

ISSN: 0302-9743

DOI: 10.1007/978-3-030-87016-4_30

Pagina iniziale: 398

Pagina finale: 412

Contributo del candidato: Contribuzione alla stesura del manoscritto.

Altre informazioni: Questa pubblicazione non è stata ancora indicizzata nella banca dati Scopus

Impact Factor (IF): 0 - vedi il campo 'altre informazioni'

Citazioni: 0

Anni decorsi: 0

Media citazioni/anno: 0

Banca dati: Si veda "altre informazioni".

Nome del file caricato: ICCSA_2021_12958.pdf (848 Kb)

CHIETI, 05/10/2021

Luogo e data



ELENCO PRODUZIONE SCIENTIFICA COMPLESSIVA

Domanda n. 1647 - Roberto Paciotti

Il sottoscritto Paciotti Roberto precisa che il settore concorsuale 03/B1 rientra nell'elenco dei settori bibliometrici ed, inoltre, dichiara con riferimento alla propria produzione scientifica complessiva quanto segue:

1. **Periodo di riferimento** (*periodo in cui la produzione è stata posta in essere*): dal 2015 al 2021
2. **Consistenza della produzione scientifica complessiva** (*numero totale delle pubblicazioni, con riferimento al periodo indicato*): 17
3. **Intensità della produzione scientifica complessiva** (*media delle pubblicazioni per anno, con riferimento al periodo indicato*): 2.83
4. **Continuità della produzione scientifica complessiva** (*numero di anni continuativi della produzione scientifica, con riferimento al periodo indicato*): 6

File allegato: [Elenco_pubblicazioni_scientifiche.pdf](#)

CHIETI, 05/10/2021

Luogo e data

Roberto Paciotti
Firma autografa

Elenco delle pubblicazioni scientifiche

1. R. Paciotti, C. Coletti, N. Re, D. Scuderi, B. Chiavarino, S. Fornarini, M. E. Crestoni **Serine O-sulfation probed by IRMPD spectroscopy**, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17(39), 25891-25904. doi: 10.1039/C5CP01409C ISSN: 14639076
2. R. Paciotti, D. Corinti, A. De Petris, A. Ciavardini, S. Piccirillo, C. Coletti, N. Re, P. Maitre, B. Bellina, P. Barran, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **Cisplatin and transplatin interaction with methionine: bonding motifs assayed by vibrational spectroscopy in the isolated ionic complexes** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19(39), 26697-26707. doi: 10.1039/C7CP05203K ISSN: 14639076
3. D. Corinti, C. Coletti, N. Re, R. Paciotti, P. Maitre, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **Short-lived intermediates (encounter complexes) in cisplatin ligand exchange elucidated by infrared ion spectroscopy** *Int. J. Mass. Spectrom.* **2019**, 435, pp. 7-17. doi: 10.1016/j.ijms.2018.10.012 ISSN: 13873806
4. I. Tolbatov, T. Marzo, D. Cirri, C. Gabbiani, C. Coletti, A. Marrone, R. Paciotti, L. Messori, N. Re **Reactions of cisplatin and cis-[PtI₂(NH₃)₂] with molecular models of relevant protein sidechains: A comparative analysis** *J. Inorg. Biochem.* **2020**, 209, 111096, pp. 1-9. doi: 10.1016/j.jinorgbio.2020.111096 ISSN: 01620134
5. R. Paciotti, D. Corinti, P. Maitre, C. Coletti, N. Re, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **From Preassociation to Chelation: A Survey of Cisplatin Interaction with Methionine at Molecular Level by IR Ion Spectroscopy and Computations** *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **2021**, 32(8), pp. 2206–2217. doi: 10.1021/jasms.1c00152 ISSN: 10440305
6. D. Corinti, R. Paciotti, N. Re, C. Coletti, B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini **Binding motifs of cisplatin interaction with simple biomolecules and aminoacid targets probed by IR ion spectroscopy** *Pure Appl. Chem.* **2020**, 92(1), pp. 3–13. doi: 10.1515/pac-2019-0110 ISSN: 00334545
7. R. Paciotti*, M. Agamennone, C. Coletti, Lorian Storchi **Characterization of PD-L1 binding sites by a combined FMO/GRID-DRY approach** *J. Comput. Aided Mol. Des.* **2020**, 34 (8), pp. 897–914. doi: 10.1007/s10822-020-00306-0 ISSN: 0920654X
8. E. Berrino, S. Carradori, A. Angeli, F. Carta, C. T. Supuran, P. Guglielmi, C. Coletti, R. Paciotti, H. Schweikl, F. Maestrelli, E. Cerbai, M. Gallorini **Dual Carbonic Anhydrase IX/XII Inhibitors and Carbon Monoxide Releasing Molecules Modulate LPS-Mediated Inflammation in Mouse Macrophages** *Antioxidants* **2021**, 10(1), pp. 1-24, 56. doi: 10.3390/antiox10010056 ISSN: 20763921
9. M. Agamennone, L. Storchi, A. Marrone, R. Paciotti* **Hampering the early aggregation of PrP-E200K protein by charge-based inhibitors: a computational study** *J. Comput. Aided Mol. Des.* **2021**, 35(6), pp. 751–770. doi: 10.1007/s10822-021-00393-7 ISSN: 0920654X

10. R. Paciotti, L. Storchi, A. Marrone **An insight of early PrP^{E200K} aggregation by combined molecular dynamics/fragment molecular orbital approaches** *Proteins* **2019**; *87*(1), pp. 51-61. doi: 10.1002/prot.25621 ISSN: 08873585
11. C. Maccallini, M. Montagnani, R. Paciotti, A. Ammazalorso, B. De Filippis, M. Di Matteo, S. Di Silvestre, M. Fantacuzzi, L. Giampietro, M. A. Potenza, N. Re, A. Pandolfi, R. Amoroso **Selective Acetamidine-Based Nitric Oxide Synthase Inhibitors: Synthesis, Docking, and Biological Studies** *ACS Med. Chem. Lett.* **2015**, *6*(6), pp. 635–640. doi: 10.1021/acsmedchemlett.5b00149 ISSN: 19485875
12. L. Storchi, R. Paciotti, N. Re, A. Marrone **Investigation of the molecular similarity in closely related protein systems: The PrP case study** *Proteins* **2015**, *83*(10), pp. 1751–1765. doi: 10.1002/prot.24836 ISSN: 08873585
13. R. Paciotti, I. Tolbatov, V. Graziani, A. Marrone, N. Re, C. Coletti **Insights on the activity of platinum-based anticancer complexes through computational methods** *AIP Conf. Proc.* **2018**, 2040, 020019-1–020019-4. doi: 10.1063/1.5079061 ISSN: 0094243X
14. N. Re, M. Fantacuzzi, C. Maccallini, R. Paciotti, R. Amoroso **Recent Developments of Amidine-like Compounds as Selective NOS Inhibitors** *Current Enzyme Inhibition* **2016**, *12*(1), pp. 30-39. doi: 10.2174/1573408012999151109100557 ISSN: 15734080
15. R. Paciotti, I. Tolbatov, A. Marrone, L. Storchi, N. Re, C. Coletti **Computational Investigations of Bioinorganic Complexes: The Case of Calcium, Gold and Platinum Ions** *AIP Conf. Proc.* **2019**, 2186, pp. 030011-1–030011-4.
16. C. Coletti, D. Corinti, R. Paciotti, N. Re, M. E. Crestoni, S. Fornarini **Structure and dynamics of gas phase ions: Interplay between experiments and computations in IRMPD spectroscopy** *AIP Conf. Proc.* **2017**, 1906(1), 030011-1-030011-4. doi: 10.1063/1.5012290 ISSN: 0094243X
17. S. Genovese, S. Fiorito, V. A. Taddeo, F. Epifano, R. Paciotti, C. Coletti, S. Franceschelli, L. Speranza, A. Ferrone, M. Felaco, A. Patruno **Effects of geranyloxycinnamic acids on COX-2 and iNOS functionalities in LPS-stimulated U937 mononuclear cells** *ChemistrySelect* **2016**, *1*(17), 5479-5486. doi: 10.1002/slct.201601091 ISSN: 23656549
18. I. Tolbatov, A. Marrone, R. Paciotti, N. Re, C. Coletti **Multilayered Modelling of the Metallation of Biological Targets** (2021) In: Gervasi O. et al. (eds) *Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021*. ICCSA 2021. Lecture Notes in Computer Science, vol 12958. Springer, Cham. doi: 10.1007/978-3-030-87016-4_30 ISSN: 0302-9743
Nota: questa pubblicazione non è stata ancora indicizzata nella banca dati Scopus.