



# Università degli Studi di Ferrara

**PROCEDURA DI SELEZIONE PER TITOLI PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE UNIVERSITARIO DI SECONDA FASCIA AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 6 DELLA LEGGE 240/2010 INDETTA CON AVVISO PUBBLICATO ALL'ALBO DI ATENEIO IL 16/05/2014 REPERTORIO N. 108/2014 PROT. n. 12770, DIPARTIMENTO DI Scienze Chimiche e Farmaceutiche SETTORE CONCORSUALE 03/A2 SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02.**

## VERBALE N. 1

Alle ore 9:00 del giorno 19/06/2014 si riunisce la Commissione giudicatrice della selezione per titoli per la copertura di n. 1 posto di Professore universitario di seconda fascia ai sensi dell'art. 24 comma 6 della Legge 240/2010 indetta con avviso pubblicato all'Albo di Ateneo il 16/05/2014 Repertorio n. 108/2014 Prot. n. 12770, Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche Settore concorsuale 03/A2 Settore scientifico-disciplinare CHIM/02, nominata con D.R. n. 15257 dell'11/06/2014 così composta:

- Prof. Pietro Decleva
- Prof. Maurizio Persico
- Prof. Renzo Cimiraglia

I Prof. Decleva e Persico partecipano in collegamento telematico dalle sedi di Trieste e Pisa, rispettivamente.

La Commissione procede immediatamente alla nomina del Presidente nella persona del Prof. Pietro Decleva e del Segretario nella persona del Prof. Renzo Cimiraglia.

La Commissione prende atto che entro i termini fissati dall'avviso di selezione hanno presentato domanda di ammissione i seguenti candidati:

| Cognome | Nome      | Nato a    | Data       |
|---------|-----------|-----------|------------|
| Angeli  | Celestino | Cles (TN) | 03/07/1969 |

Ognuno dei membri dichiara di non avere relazioni di parentela ed affinità, entro il 4° grado incluso, con gli altri commissari e con il candidato (art. 5 comma 2 D.lgs. 07.05.48 n. 1172).

Dichiara, altresì, che non sussistono le cause di astensione di cui all'art. 51 c.p.c..

Quindi, presa visione degli atti normativi e regolamentari che disciplinano lo svolgimento della selezione, la Commissione procede alla valutazione del candidato in conformità agli standard qualitativi e agli ulteriori elementi di qualificazione richiesti dal Dipartimento.

La selezione prevede una valutazione del curriculum dell'attività didattica, scientifica (ed assistenziale, ove previsto) e dell'elenco delle pubblicazioni scientifiche, presentati dal candidato.



# Università degli Studi di Ferrara

La Commissione procede pertanto ad aprire i plichi, contenenti il curriculum, l'elenco delle pubblicazioni e la copia del giudizio di abilitazione regolarmente inviati dal candidato e a formulare un motivato giudizio sul candidato.

I giudizi espressi sono raccolti nell'Allegato A al presente verbale.

La Commissione esprime, la seguente valutazione sul candidato:

Il Dr. Celestino Angeli è pienamente meritevole di ricoprire il ruolo di Professore Associato per il settore scientifico-disciplinare CHIM/02.

Sulla base di quanto emerge dalla valutazione comparativa, la Commissione individua all'unanimità nel Dott. Celestino Angeli il candidato maggiormente qualificato da proporre al Consiglio di Dipartimento per la chiamata ai sensi dell'art. 24 c. 6 Legge 240/2010.

La commissione consegna al responsabile del procedimento gli atti concorsuali in plico chiuso e sigillato con l'apposizione della firma del segretario della commissione sui lembi di chiusura.

La Commissione viene sciolta alle ore 13.

Ferrara, 19/06/2014

Letto, approvato e sottoscritto

La Commissione

Prof. Pietro Decleva (in collegamento telematico)

Prof. Maurizio Persico (in collegamento telematico)

Prof. Renzo Cimiraglia *Renzo Cimiraglia*



# Università degli Studi di Ferrara

## ALLEGATO A

Giudizio sul curriculum dell'attività didattica, scientifica (ed assistenziale, ove previsto)

**CANDIDATO: Angeli Celestino**

### GIUDIZIO DELLA COMMISSIONE:

**Giudizio sull'attività didattica.** Il giudizio della commissione si articola in base ai requisiti indicati nell'art. 3, comma 1 del DM n. 344 del 2011:

a) numero dei moduli/corsi tenuti e continuità della tenuta degli stessi: dall'A.A. 1999/2000 fino all'A.A. 2003/2004 il candidato ha tenuto il secondo modulo del corso “Laboratorio di Chimica Fisica III” (4.5 crediti) per il CdL in Chimica. Dall'A.A. 2002/2003 fino all'A.A. 2008/2009 il candidato è stato titolare del corso “Chimica Fisica” (6 crediti) presso il CdL in Fisica. Nell'A.A. 2003/2004 ha tenuto il secondo modulo del corso “Laboratorio di Chimica Fisica II” (3 crediti) presso il CdL in Chimica. Dall'A.A. 2004/2005 fino all'A.A. 2009/2010 è stato titolare del corso “Chimica & Informatica” (2 crediti) presso il CdL in Chimica. Dall'A.A. 2010-2011 fino ad oggi il candidato è titolare del corso “Termodinamica e Modellistica Molecolare” (6 crediti) presso il CdL magistrale in Scienze Chimiche, inoltre, nel corrente A.A. 2013/2014 è titolare del corso “Chimica Fisica Avanzata” (6 crediti) presso il CdL magistrale in Scienze Chimiche. Infine, nel corrente A.A. 2013-2014 il candidato è titolare del corso “Modern Theoretical and Computational Techniques in molecular Quantum Mechanics” presso il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (6 crediti). Si segnala inoltre che il Dr. Angeli ha trascorso un mese (febbraio 2013) come “Professeur invité” presso l'Università di Strasburgo dove ha tenuto un corso di 8 ore dal titolo “Electron Correlation in Molecules”.

b) esiti della valutazione da parte degli studenti: la valutazione degli studenti sui corsi tenuti dal Dr. Angeli, così come appare dalle schede valutative predisposte dall'Università di Ferrara (consultabili presso il sito internet <https://valmon.disia.unifi.it/sisvaldidat/unife/index.php>), risulta positiva. A mo' d'esempio si riportano le valutazioni relative al quesito D25 (“sei complessivamente soddisfatto di come è stato svolto l'insegnamento?”) per il corso “Termodinamica e Modellistica Molecolare” negli A.A. 2010/2011-2012/2013: 7.27, 9.29 e 7.07, rispettivamente (la sufficienza è pari a 6).

c) partecipazione alle commissioni istituite per gli esami di profitto: fin dalla nomina a ricercatore universitario il candidato ha sempre partecipato alle commissioni di esame per vari insegnamenti del SSD CHIM/02, quali “Chimica Fisica II”, “Spettroscopia Molecolare”, “Chimica Teorica”, etc.

d) tesi di laurea e di dottorato: il Dr. Angeli è stato relatore o correlatore di 10 tesi di laurea (4 quinquennali, 3 triennali e 3 magistrali) ed è attualmente tutore di un dottorando del corso di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche.

Si segnala inoltre che l'interesse del dr. Angeli per la didattica della Chimica Fisica si è anche concretizzato nella pubblicazione di 4 articoli nella rinomata rivista didattica dell'ACS “Journal of Chemical Education”.

Alla luce delle considerazioni sopraesposte la commissione esprime un giudizio pienamente positivo sull'attività didattica del Dr. Angeli.



# Università degli Studi di Ferrara

## Giudizio sull'attività di ricerca.

La commissione ha esaminato l'attività di ricerca del candidato tenendo conto delle indicazioni enunciate nel succitato DM n. 344 del 2011 (art. 4, commi 1,2,3 e 4).

a) Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, ovvero partecipazione agli stessi: il Dr. Angeli è risultato responsabile del progetto “Modellizzazione di processi di diffusione” finanziato da un contratto ENI per il periodo giugno 2009-giugno 2011 e del progetto “Simulazione numerica del processo di diffusione” (contratto ENI per il periodo ottobre 2012-ottobre 2015). Il candidato è altresì responsabile del progetto “Establishment of an international research group for the study and characterization of molecular magnets” finanziato da un bando di Ateneo per iniziative di internazionalizzazione dell'Università di Ferrara per l'anno 2013. Il candidato ha inoltre partecipato ai progetti PRIN dei seguenti anni presso l'unità di ricerca dell'Università di Ferrara:

2009 (Calcolo di proprietà molecolari mediante funzioni d'onda ben correlate),

2006 (Sviluppi teorici e applicazioni di metodi quantomeccanici per lo studio di proprietà elettroniche, spettroscopiche, strutturali e di trasporto di molecole polimeri e sistemi condensati.)

2004 (Metodologie teoriche e computazionali per il calcolo accurato di proprietà molecolari)

2000 (Metodologie teoriche, tecniche computazionali e spettroscopiche per l'indagine di proprietà molecolari)

b) partecipazione in qualità di relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali: il candidato ha presentato circa 50 comunicazioni a congressi nazionali e internazionali, spesso su invito. Ad esempio, nel periodo 2010-2014 il candidato è stato invitato a tenere otto comunicazioni orali in congressi internazionali svoltisi in India (1), Spagna (3), Francia (2), Germania (2).

c) Valutazione delle pubblicazioni scientifiche.

Il Dr. Angeli è autore di 96 articoli pubblicati su riviste scientifiche di ottima diffusione internazionale. Le principali riviste su cui il candidato ha pubblicato sono: Journal of Chemical Physics (25 articoli), Theoretical Chemistry Accounts (13), Chemical Physics Letters (8), Molecular Physics (7), Journal of Chemical Education (4), Journal of Computational Chemistry (4), Journal of Chemical Theory and Computation (4), Journal of Physical Chemistry A (3), International Journal of Quantum Chemistry (3), Physical Chemistry-Chemical Physics (3), Computer Physics Communications (3), etc.

Le principali tematiche di ricerca sviluppate dal candidato riguardano:

1) Sviluppi metodologici nel campo delle teorie perturbative multireference. Di particolare rilevanza, in questo ambito, appare la formulazione e implementazione pratica della “n-electron Valence State Perturbation Theory” che ha destato notevole interesse, tra l'altro, per la definitiva risoluzione dell'arduo problema degli “intruder states”.

2) Sviluppi metodologici nel campo della costruzione *a priori* di orbitali localizzati.

3) Sviluppi metodologici riguardanti la tecnica Valence Bond tramite orbitali ortogonali.

4) Studio accurato della spettroscopia di molecole di piccole e medie dimensioni, anche in connessione con la fotoestrazione di elettroni nei gusci interni.

5) Studi concernenti la simulazione del processo di diffusione in sistemi composti da sali in soluzione acquosa.



# Università degli Studi di Ferrara

Dall'esame dell'insieme delle pubblicazioni del Dr. Angeli emerge un forte interesse verso gli aspetti metodologici della Chimica Fisica teorica e computazionale, accompagnato dalla capacità di creare modelli innovativi e di implementare nuovi codici di calcolo.

d) Indicatori bibliometrici. Dall'esame del database "Web of science" di Thomson Reuters si desumono i seguenti dati concernenti la produzione scientifica del candidato:

numero di citazioni: 1726

numero annuo medio di citazioni: 86,30

impact factor totale: 257

impact factor normalizzato: 73,24

impact factor normalizzato medio: 0,76

indice di Hirsch: 21

A conclusione della valutazione dell'attività di ricerca scientifica del Dr. Angeli, la commissione unanime esprime il seguente giudizio:

a) il candidato mostra capacità di dirigere un gruppo di ricerca e di sapere attrarre finanziamenti.

b) l'attività di ricerca del candidato è del tutto coerente con le tematiche del settore scientifico-disciplinare CHIM/02.

c) si riscontra un notevole apporto individuale del candidato nei lavori scientifici in collaborazione

d) la qualità della produzione scientifica del candidato è elevata e mostra originalità, rigore metodologico e, sovente, carattere innovativo

e) la collocazione editoriale dei prodotti scientifici del candidato, interamente affidata a riviste che assicurano una revisione tra pari, incontra criteri di eccellenza.

Letto, approvato e sottoscritto seduta stante

La Commissione

Prof. Pietro Decleva (in collegamento telematico)

Prof. Maurizio Persico (in collegamento telematico)

Prof. Renzo Cimiraglia *Renzo Cimiraglia*



# Università degli Studi di Ferrara

**PROCEDURA DI SELEZIONE PER TITOLI PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE UNIVERSITARIO DI seconda FASCIA AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 6 DELLA LEGGE 240/2010 INDETTA CON AVVISO PUBBLICATO ALL'ALBO DI ATENEO IL 16/05/2014 REPERTORIO N. 108/2014 PROT. N. 12770 DEL 16/05/2014, DIPARTIMENTO DI Scienze Chimiche e Farmaceutiche SETTORE CONCURSALE 03/A2 SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 .**

Il sottoscritto, Prof. Pietro Decleva, membro della commissione giudicatrice della selezione per titoli per la copertura di n. 1 posto di Professore universitario di seconda fascia ai sensi dell'art. 24 comma 6 della Legge 240/2010 indetta con avviso pubblicato all'Albo di Ateneo il 16/05/2014 Repertorio n. 108/2014 Prot. n. 12770, Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche Settore concorsuale 03/A2 Settore scientifico-disciplinare CHIM/02, dichiara di aver partecipato, per via telematica, alla seduta della Commissione del 19/06/2014.

Dichiara inoltre di concordare con il verbale a firma degli altri membri della Commissione.

Trieste, lì 19/06/2014.

Pietro Decleva



# Università degli Studi di Ferrara

**PROCEDURA DI SELEZIONE PER TITOLI PER LA COPERTURA DI N. 1 POSTO DI PROFESSORE UNIVERSITARIO DI seconda FASCIA AI SENSI DELL'ART. 24 COMMA 6 DELLA LEGGE 240/2010 INDETTA CON AVVISO PUBBLICATO ALL'ALBO DI ATENEO IL 16/05/2014 REPERTORIO N. 108/2014 PROT. N. 12770 DEL 16/05/2014, DIPARTIMENTO DI Scienze Chimiche e Farmaceutiche SETTORE CONCURSALE 03/A2 SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE CHIM/02 .**

Il sottoscritto, Prof. Maurizio Persico, membro della commissione giudicatrice della selezione per titoli per la copertura di n. 1 posto di Professore universitario di seconda fascia ai sensi dell'art. 24 comma 6 della Legge 240/2010 indetta con avviso pubblicato all'Albo di Ateneo il 16/05/2014 Repertorio n. 108/2014 Prot. n. 12770, Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche Settore concorsuale 03/A2 Settore scientifico-disciplinare CHIM/02, dichiara di aver partecipato, per via telematica, alla seduta della Commissione del 19/06/2014.

Dichiara inoltre di concordare con il verbale a firma degli altri membri della Commissione.

Pisa, li 19/06/2014.

*M. Persico*