

## Curriculum Vitae

### Esperienza professionale

Date	01/03/2010-28/02/2011
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2011-29/02/2012
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2012-28/02/2013
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2013-28/02/2014
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2014-28/02/2015
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di una metodologia integrata computazionale e sperimentale per lo studio di sistemi disordinati". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2015-29/02/2016
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2016-28/02/2017
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2017-28/02/2018
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi avanzati teorico sperimentali per lo studio di sistemi complessi". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02
Date	01/03/2018-31/08/2019
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Sviluppo di metodi statistici e chemiometrici per l'ottimizzazione di biomarcatori di latte vaccino e bufalino". Nei periodi 27/6/2018-26/7/2018 e 8/1/2019-8/6/2019 il contratto è stato sospeso rispettivamente per gravidanza a rischio e maternità.
Date	01/12/2019-30/11/2020
Posizione ricoperta	Titolare di Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Una nuova classe di solventi verdi: i solventi eutettici profondi". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02

Date 01/06/2021-attualmente in corso  
Posizione ricoperta Ricercatore a tempo determinato di tipo A (RTDA) - SSD CHIM/02 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".

## Qualifiche

Data 1/12/2014  
Qualifica conseguita Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato (seconda fascia) in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 - Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici).

Data 03/08/2017  
Qualifica conseguita Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato (seconda fascia) in Chimica Fisica (settore concorsuale 03/A2 - Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche).

Data 07/08/2018  
Qualifica conseguita Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato (seconda fascia) in Chimica Generale ed Inorganica (settore concorsuale 03/B1 - Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici).

Data 25/10/2018  
Qualifica conseguita Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato (seconda fascia) in Fondamenti Chimici delle Tecnologie (settore concorsuale 03/B2 - Fondamenti Chimici delle Tecnologie).

## Istruzione e formazione

Data 17/12/2009  
Qualifica conseguita Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza". Relatrice: Prof.ssa Paola D'Angelo. Titolo della tesi: "A combined theoretical and experimental investigation of Ion Hydration".

Data 21/9/2006  
Qualifica conseguita Laurea in Chimica presso l'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" con la votazione di 110/110 e Lode. Titolo della tesi: "Studio strutturale e dinamico di soluzioni acquose di  $Hg^{2+}$  e  $Cd^{2+}$  attraverso metodi computazionali e spettroscopia di assorbimento dei raggi X".

Media degli esami: 29/30.

Data 07/1999  
Qualifica conseguita Diploma in Maturità Classica presso il Liceo Ginnasio Statale Giulio Cesare di Roma.

## Competenze linguistiche

Madrelingua	Italiano
Altre lingue	Inglese
Capacità di lettura	Ottima
Capacità di scrittura	Ottima
Capacità di espressione orale	Ottima

## Competenze informatiche

Ottima conoscenza del sistema operativo GNU/Linux.

Conoscenza approfondita del prodotto Latex per la composizione di documenti scientifici.

Ottima conoscenza dei linguaggi FORTRAN, awk e shell scripting, e di pacchetti software per calcoli ab initio e simulazioni di Dinamica Molecolare classica e quantistica (come GAUSSIAN, GROMACS, CPMD, DL\_POLY).

## Attività didattica

Date	a.a. 2020/2021 - 2021/2022
Attività	Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (SSD: CHIM/02) per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica presso l'Università degli studi di Roma "La Sapienza".
Date	a.a. 2019/2020 - 2021/2022
Attività	Corso di dottorato "Metodi computazionali per lo studio di sistemi molecolari complessi" per gli studenti del corso di dottorato in Scienze Chimiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".
Date	a.a. 2020/2021 - 2021/2022
Attività	Membro delle commissioni di laurea triennali e magistrali per il CAD in Chimica (L27-LM54).
Date	a.a. 2007/2008, 2008/2009, 2009/2010, 2010/2011, 2011/2012, 2012/2013, 2013/2014, 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018
Attività	Esercitazioni del corso di Chimica Fisica II (MZ) (II anno della Laurea triennale in Chimica) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza". Il programma del corso verte principalmente sulla Meccanica Quantistica, a partire dai postulati fondamentali fino alla trattazione quantistica delle molecole poliatomiche.
Date	2012 - 2018
Attività	Assistenza nella Supervisione di tesi di Laurea magistrale e triennale in Chimica e nella supervisione di dottorandi di ricerca (in particolare di 2 dottorandi di ricerca, 5 lauree magistrali e più di 10 lauree triennali).
Date	a.a. 2006/2007
Attività	Contratto di tutorato per l'espletamento di attività di tutorato, didattico-integrative, propedeutiche e di recupero presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".

## Partecipazione a scuole post-lauream

Partecipazione al corso: "Understanding Molecular Simulations". 7-18 Gennaio 2008. Università di Amsterdam. Amsterdam.

Partecipazione al corso: "Ottimizzazione di codici scientifico tecnici". 17-19 Marzo 2009. CASPUR. Roma.

Partecipazione al corso: "Introduzione all'HPC: calcolo parallelo". 12-14 Maggio 2009. CASPUR. Roma.

Partecipazione al corso: "Scripting in Python". 25-28 Ottobre 2011. CASPUR. Roma.

## Partecipazione a congressi e workshops

"Terzo Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Zn<sup>2+</sup> ion hydration under pressure". 18-19 Giugno 2008. Università "La Sapienza". Roma.

"XXXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana". 5-10 Luglio 2009. Sorrento.

"14th International Conference on X-ray Absorption Fine structure (XAFS14)". Presentazione di un contributo orale dal titolo "Ion Hydration in high-density water". 26-31 Luglio 2009. Camerino.

"CECAM workshop on Aqueous Solvation of Ions". Presentazione di un contributo orale dal titolo "A combined theoretical and experimental investigation of ion hydration". 22-24 Febbraio 2010. CECAM-ETHZ, Zurigo, Svizzera.

"International Conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices - ILED-2" Presentazione di un poster dal titolo: "A combined Molecular Dynamics and X-ray diffraction study of protic ionic liquid/water mixtures" 09-11 Giugno 2010. Roma.

"Quarto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Studio strutturale e dinamico della coordinazione in acqua dello ione  $\text{Br}^-$ ". 16-17 Giugno 2010. Università "La Sapienza". Roma.

"Quinto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Effetto degli ioni  $\text{Zn}^{2+}$  e  $\text{Hg}^{2+}$  sulla struttura dell'acqua". 12-13 Giugno 2012. Università "La Sapienza". Roma.

"Sesto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Le funzioni di Wannier: uno sguardo su strutture e dinamiche nascoste". 17-18 Giugno 2014. Università "La Sapienza". Roma.

"Computer Simulations for condensed phase systems: from correlated electrons to novel materials". 4-6 Maggio 2015. Sede Centrale del CNR. Roma.

Invited Speaker al congresso: "EMN Bangkok Meeting on Materials 2015". Presentazione di un invited talk dal titolo: "Local order and long range correlations in Imidazolium Halide Ionic Liquids". 10-13 Novembre 2015. Bangkok. Thailandia.

"III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana". Presentazione di un contributo orale dal titolo: "The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs". 14-16 Dicembre 2015. Sede Centrale del CNR. Roma.

"XXIV SILS (Società italiana luce di Sinctrotrone) meeting 2016". Presentazione di un poster dal titolo: "Unraveling the coordination geometry of  $\text{Sc}^{3+}$  in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule". 21-23 Settembre 2016. Dipartimento di Fisica, Università di Bari. Bari.

"IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana". Presentazione di un poster dal titolo: " $\text{Sc}^{3+}$  in aqueous solution: the strange case of the far-coordinated water molecule". 3-5 Ottobre 2016. Scuola Normale Superiore. Pisa.

"XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana". Presentazione di un contributo orale dal titolo: "Unraveling the solvation properties of Lanthanide (3+) ions: a combined Molecular Dynamics and XAS approach". 1-4 Luglio 2019. Università "La Sapienza". Roma.

"XXVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana". Presentazione di un contributo orale dal titolo: "Unraveling the solvation properties of Lanthanide (3+) ions: from molecular solvents to Ionic Liquid based systems." 14-23 Settembre 2021. Evento online.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2010 - prot. C26A10H5T8. Fondi assegnati: 85.000 euro. Titolo: "PROTIC IONIC LIQUIDS: a structural and spectroscopic study by means of experimental and computational techniques." Ruolo ricoperto: Partecipante.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2011- prot. C26A11SMBW. Fondi assegnati: 80.000 euro. Titolo: "The structure of metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies." Ruolo ricoperto: Partecipante.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2012 - prot.C26A129ZAY. Fondi assegnati: 64.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in task specific ionic liquids: a combined experimental and theoretical investigation." Ruolo ricoperto: Partecipante.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2013 - prot.C26A13K8AN. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in complex liquids: a combined XAS and MD investigation." Ruolo ricoperto: Partecipante.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA. Anno:2013-2014 - grant HP10CCQEUQ "The coordination chemistry of lanthanides and actinides in Ionic Liquids." 1070000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2014 - prot.C26A14L7CX. Fondi assegnati: 50.000 euro. Titolo: "The role of metal ions in the prion conversion of different human prion protein variants." Ruolo ricoperto: Partecipante.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2015 - grant HP10C2Q0F3 "Structure and properties of geminal dicationic Ionic Liquids/water mixtures." 1100000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2015 - prot. C26H159F5B. Fondi assegnati: 30000 euro. Titolo: "Hydrogen Peroxide Activation by Non-Heme Iron Complexes: A Route for Sustainable and Selective Oxidation Processes." Ruolo ricoperto: Partecipante.

PROGETTI per avvio alla RICERCA Università La Sapienza 2015- prot. C26N159PNB. Fondi assegnati: 3.000 euro. Titolo: "Unraveling halide hydration: the interplay of Car-Parrinello Molecular Dynamics and EXAFS spectroscopy." Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2016 - Fondi assegnati: 36600 euro. Titolo: "Deep eutectic mixtures: a new generation of green solvents." Ruolo ricoperto: Partecipante.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2017 - grant HP10CZTDIS "Unraveling the peculiar properties of a new generation of green solvents: the deep eutectic solvents" 2100000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2018-2019 - grant HP10CGVY3L "Deep eutectic solvents: a combined theoretical and experimental study of the structural and dynamic properties" 400000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2020 - grant HP10C7XQP3 "Unveiling the nanostructure of aqueous and methanol mixtures of Deep Eutectic Solvents" 60000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

## Incarichi

Date	2009 Rappresentante dei Dottorandi di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".
Date	2011-2018 Rappresentante degli Assegnisti di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza".

## Partecipazione a comitati scientifici

Date	2012-ancora in corso Reviewer di numerose riviste scientifiche internazionali dell'American Chemical Society, dell'American Institute of Physics, di Elsevier e della Royal Society of Chemistry, tra le quali: Inorganic Chemistry, Journal of Physical Chemistry, Journal of Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Molecular Liquids, Catalysis Science & Technology, Nanoscale e Journal of Chemical Information and Modeling.
------	--

## Riconoscimenti

L'articolo "Hydration Properties of the Bromide Aqua Ion: the Interplay of First Principle and Classical Molecular Dynamics, and X-ray Absorption Spectroscopy" (P. D'Angelo, V. Migliorati, L. Guidoni, Inorg. Chem. 49, 4224, 2010) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli ESRF HIGHLIGHTS 2010.

L'articolo "The non-octarepeat copper binding site of the prion protein is a key regulator of prion conversion" (G. Giachin, P.T. Mai, T.H. Tran, G. Salzano, F. Benetti, V. Migliorati, A. Arcovito, S. della Longa, G. Mancini, P. D'Angelo, G. Legname, Sci Rep. 5, 15253, 2015) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli ESRF HIGHLIGHTS 2015.

L'articolo "How Does Ce<sup>III</sup> Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study" (A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo, Chem. Eur. J. 23, 8424, 2017) è stato selezionato per la pubblicazione dell'Inside Back Cover (DOI: 10.1002/chem.201701561) dalla rivista Chemistry - a European Journal.

L'articolo "Following a chemical reaction on the millisecond time scale by simultaneous X-ray and UV/Vis spectroscopy" (G. Olivo, A. Barbieri, V. Dantignana, F. Sessa, V. Migliorati, M. Monte, S. Pascarelli, T. Narayanan, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, P. D'Angelo, J. Phys. Chem. Lett. 8, 2958, 2017) è stato selezionato come una delle ricerche più interessanti tra quelle condotte utilizzando la luce di sincrotrone allo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) di Grenoble ed è stato incluso negli Spotlight on Science.

## Attività di Ricerca

L'attività di ricerca è incentrata prevalentemente sullo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi disordinati attraverso approcci integrati innovativi, che combinano simulazioni di Dinamica Molecolare (DM) e diverse tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) e la diffrazione dei raggi X. Gli interessi scientifici abbracciano diversi campi della Chimica Fisica, come lo sviluppo di campi di forza classici attraverso calcoli ab initio, lo studio di soluzioni acquose di ioni metallici, lantanidi ed alogenuri mediante simulazioni di Dinamica Molecolare ab initio o classica in combinazione con i dati sperimentali XAS, lo studio di liquidi ionici puri e in miscele con acqua e l'indagine delle proprietà di solvatazione di ioni metallici in solventi organici ed in liquidi ionici. In particolare, si è dedicata allo studio di soluzioni acquose di ioni metallici attraverso una metodologia che combina la Dinamica Molecolare con la spettroscopia EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure). Data la difficoltà di ottenere informazioni accurate su sistemi disordinati utilizzando un singolo metodo di indagine, l'approccio EXAFS-DM si è rivelato essenziale per ottenere informazioni strutturali attendibili su questi sistemi. Inoltre ha perfezionato e applicato allo studio delle proprietà di idratazione di ioni un metodo di analisi dei dati XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) che permette di calcolare uno spettro XANES teorico, da confrontare con il dato sperimentale, come media configurazionale di un set di configurazioni estratte dalle simulazioni di Dinamica Molecolare. Tale procedura combinata XANES-DM ha fornito uno strumento prezioso per ottenere una descrizione tridimensionale accurata della geometria di coordinazione degli ioni metallici in soluzione acquosa. Ha applicato questi metodi di indagine anche allo studio di soluzioni acquose di ioni metallici in condizioni estreme di pressione (fino a 6.4 GPa) e allo studio dell'effetto degli ioni sulla struttura dell'acqua, argomento ampiamente dibattuto in letteratura negli ultimi decenni. Ha inoltre studiato le proprietà di idratazione di ioni alogenuro combinando la spettroscopia XAS con simulazioni di Dinamica Molecolare classica e di tipo Car-Parrinello. Ha esteso e applicato la procedura XANES-DM e EXAFS-DM allo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di ioni metallici in solventi organici. In questo ambito, ha anche sviluppato attraverso calcoli ab-initio dei potenziali di interazione ione-solvente da utilizzare nelle simulazioni, dimostrandone la validità attraverso il confronto con i dati sperimentali XAS. Ha inoltre sviluppato dei metodi innovativi di analisi delle simulazioni che le hanno permesso di identificare le geometrie di coordinazione di ioni metallici come lo ione Scandio(3+) o ioni alogenuro come lo ione bromuro. I metodi messi a punto possono essere utilizzati in futuro per determinare le geometrie di coordinazione di altri ioni in soluzione, geometrie che spesso risulta molto difficile identificare a causa della elevata mobilità delle molecole di solvente e del disordine intrinseco di questo tipo di sistemi. Si è inoltre dedicata allo studio di liquidi ionici puri, di miscele formate da acqua e liquidi ionici e della solvatazione di ioni metallici in liquidi ionici sempre utilizzando simulazioni di Dinamica Molecolare e la spettroscopia XAS, o combinando la Dinamica Molecolare con la tecnica sperimentale di diffrazione dei raggi X. Questi approcci integrati si sono rivelati essenziali per descrivere in modo accurato la complessa rete di interazioni presente in questi sistemi.

## Partecipazione ad un gruppo di Ricerca

Partecipazione a partire da Novembre 2006 al gruppo di Ricerca XAMD inizialmente in qualità di Dottorando, successivamente come Assegnista di Ricerca e attualmente come RTD-A presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli studi di Roma "La Sapienza" coordinato dalla Prof.ssa Paola D'Angelo. Il gruppo di ricerca è caratterizzato da numerose collaborazioni nazionali ed internazionali. Queste collaborazioni hanno permesso la pubblicazione di numerosi articoli in collaborazione. Inoltre il gruppo ha ottenuto diversi progetti di Ateneo, ai quali ho preso parte come partecipante, che sono stati finanziati dall'Università di Roma "La Sapienza".

## Principali Collaborazioni

Prof. Ingmar Persson, Department of Chemistry and Biotechnology, Swedish University of Agricultural Sciences, Uppsala, Svezia. Studio delle proprietà di coordinazione di ioni Lantanidi trivalenti e di ioni metallici in soluzione acquosa, in solventi organici e in solidi cristallini.

Prof. Riccardo Spezia, Magali Duvail, Prof. Pierre Vitorge, Laboratoire Analyse et Modélisation Pour la Biologie et L'Environnement, Evry University, France. Determinazione di un nuovo set di raggi ionici per tutta la serie di ioni Lantanidi trivalenti in soluzione acquosa.

Prof. Adriano Filipponi, Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche, Università degli Studi dell'Aquila, Prof. Andrea di Cicco, Scuola di Scienze e Tecnologie, Università di Camerino, Dott. Simone de Panfilis, Centre for Life Nano Science - IIT, Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza". Studio delle proprietà di idratazione di ioni metallici in acqua in condizioni estreme di temperatura e pressione (a partire da condizioni ambiente fino a circa 6.4 GPa).

Giuliana Aquilanti, Sincrotrone Elettra di Trieste e Sakura Pascarelli, Sincrotrone ESRF di Grenoble. Studio delle proprietà strutturali e dinamiche di liquidi ionici.

Prof. Leonardo Guidoni, Dipartimento di Chimica, Ingegneria Chimica e dei materiali, Università degli studi dell'Aquila. Proprietà di idratazione di ioni alogenuro attraverso simulazioni di Dinamica Molecolare di tipo Car-Parrinello.

Prof. Vincenzo Barone, attualmente Direttore della Scuola Normale Superiore di Pisa. Studio delle proprietà di coordinazione dello ione Hg(2+) in acqua combinando simulazioni di Dinamica Molecolare, spettroscopia EXAFS e spettroscopia XANES.

## Indicatori Bibliometrici

Numero totale di articoli	60
Hirsch (H) index	28
Numero totale di citazioni	1626
Citazioni medie per articolo	27.1
	(dati Scopus)
Impact factor totale	229.007
Impact factor medio	4.089

## Pubblicazioni

*Nota: \*l'asterisco vicino al nome indica le pubblicazioni delle quali sono Corresponding Author. Gli impact factor delle riviste sono quelli calcolati in relazione all'anno della pubblicazione*

1) Matteo Busato, Giorgia Mannucci, Valerio Di Lisio, Andrea Martinelli, Alessandra Del Giudice, Alessandro Tofoni, Chiara Dal Bosco, Valentina Migliorati, Alessandra Gentili, and Paola D'Angelo. Structural Study of a Eutectic Solvent Reveals Hydrophobic Segregation and Lack of Hydrogen Bonding between the Components ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY AND ENGINEERING 10, 6337-6345 (2022). journal IF: 8.198

2) V. Migliorati\*, G. Fazio, S. Pollastri, A. Gentili, P. Tomai, F. Tavani, P. D'Angelo. Solubilization properties and structural characterization of dissociated HgO and HgCl<sub>2</sub> in deep eutectic solvents JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 329, 115505 (2021). journal IF: 6.165



- 3) V. Migliorati\*, A. Gibiino, A. Lapi, M. Busato, P. D'Angelo. On the Coordination Chemistry of the lanthanum(III) Nitrate Salt in EAN/MeOH Mixtures INORGANIC CHEMISTRY 2021, 60, 10674-10685 (2021). journal IF:5.165
- 4) V. Migliorati\*, P. D'Angelo. Deep eutectic solvents: A structural point of view on the role of the anion CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 777, 138702 (2021). journal IF: 2.328
- 5) M. Busato, V. Di Lisio, A. Del Giudice, P. Tomai, V. Migliorati, L. Galantini, A. Gentili, A. Martinelli, P. D'Angelo. Transition from molecular- to nano-scale segregation in a deep eutectic solvent - water mixture JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 331, 115747 (2021). journal IF:6.165
- 6) M. Busato, V. Migliorati, A. Del Giudice, V. Di Lisio, P. Tomai, A. Gentili, P. D'Angelo. Anatomy of a deep eutectic solvent: structural properties of choline chloride:sesamol 1:3 compared to reline PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 23, 11746-11754 (2021). journal IF:3.676
- 7) M. Busato, A. Del Giudice, V. Di Lisio, P. Tomai, V. Migliorati, A. Gentili, A. Martinelli, P. D'Angelo. Fate of a Deep Eutectic Solvent upon Cosolvent Addition: Choline Chloride-Sesamol 1:3 Mixtures with Methanol ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY AND ENGINEERING 9, 12252-12261 (2021). journal IF: 8.198
- 8) V. Migliorati\*, A. Lapi, Paola D'Angelo. Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(iii) bistriflimide salt in ionic liquid/acetonitrile mixtures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 22, 20434-20443 (2020). journal IF:3.676
- 9) M. Busato, A. Melchior, V. Migliorati, A. Colella, I. Persson, G. Mancini, D. Veclani, P. D'Angelo. Elusive Coordination of the Ag<sup>+</sup> Ion in Aqueous Solution: Evidence for a Linear Structure. INORGANIC CHEMISTRY, 59, 17291-17302 (2020). journal IF: 5.165
- 10) V. Migliorati\*, A. Caruso, Paola D'Angelo. Unraveling the Hydration Properties of the Ba<sup>2+</sup> Aqua Ion: the Interplay of Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Spectroscopy INORGANIC CHEMISTRY, 58, 14551-14559 (2019). journal IF:4.825
- 11) V. Migliorati\*, A. Filipponi, F. Sessa, A. Lapi, A. Serva, P. D'Angelo. Solvation structure of lanthanide(III) bistriflimide salts in acetonitrile solution: A molecular dynamics simulation and EXAFS investigation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 21, 13058-13069 (2019). journal IF:3.43
- 12) V. Migliorati\*, F. Sessa, P. D'Angelo. Deep eutectic solvents: A structural point of view on the role of the cation CHEMICAL PHYSICS LETTERS: X, 2,100001 (2019). journal IF: ancora non disponibile
- 13) V. Migliorati\*, A. Serva, F. Sessa, A. Lapi, P. D'Angelo. Influence of Counterions on the Hydration Structure of Lanthanide Ions in Dilute Aqueous Solutions JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 122, 2779-2791 (2018). journal IF: 2.923
- 14) F. Sessa, V. Migliorati\*, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo. On the coordination of Zn<sup>2+</sup> ion in Tf<sub>2</sub>N<sup>-</sup> based ionic liquids: structural and dynamic properties depending on the nature of the organic cation PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 20, 2662-2675 (2018). journal IF: 3.567
- 15) F. Sessa, P. D'Angelo, V. Migliorati\*. Combined distribution functions: A powerful tool to identify cation coordination geometries in liquid systems CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 691, 437-443 (2018). journal IF:1.901
- 16) F. Sessa, V. Migliorati, A. Lapi, P. D'Angelo. Ce<sup>3+</sup> and La<sup>3+</sup> ions in ethylammonium nitrate: A XANES and molecular dynamics investigation CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 706, 311-316 (2018). journal IF:1.901

- 17) V. Migliorati\*, A. Filippini, A. Di Cicco, S. De Panfilis, P. D'Angelo. Structure of Water in  $Zn^{2+}$  Aqueous Solutions from Ambient Conditions up to the Gigapascal Pressure Range: A XANES and Molecular Dynamics Study INORGANIC CHEMISTRY 56, 14013-14022 (2017). journal IF:4.700
- 18) V. Migliorati\*, A. Serva, F. M. Terenzio, P. D'Angelo. Development of Lennard-Jones and Buckingham Potentials for Lanthanoid Ions in Water. INORGANIC CHEMISTRY, 56, 6214-6224 (2017). journal IF:4.700
- 19) G. Olivo, A. Barbieri, V. Dantignana, F. Sessa, V. Migliorati, M. Monte, S. Pascarelli, T. Narayanan, O. Lanzalunga, S. Di Stefano, P. D'Angelo. Following a chemical reaction on the millisecond time scale by simultaneous X-ray and UV/Vis spectroscopy. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, 8, 2958-2963 (2017). journal IF:8.709
- 20) A. Serva, V. Migliorati, R. Spezia, P. D'Angelo. How Does Ce(III) Nitrate Dissolve in a Protic Ionic Liquid? A Combined Molecular Dynamics and EXAFS Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 23, 8424-8433 (2017). journal IF:5.160
- 21) R. Spezia, V. Migliorati, P. D'Angelo. On the development of polarizable and Lennard-Jones force fields to study hydration structure and dynamics of actinide(III) ions based on effective ionic radii. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 147, 161707 (2017). journal IF: 2.843
- 22) V. Migliorati\*, P. D'Angelo. Unraveling the  $Sc^{3+}$  Hydration Geometry: The Strange Case of the Far-Coordinated Water Molecule. INORGANIC CHEMISTRY, 55, 6703-6711 (2016). journal IF: 4.857
- 23) P. D'Angelo, V. Migliorati, F. Sessa, G. Mancini, I. Persson. XANES Reveals the Flexible Nature of Hydrated Strontium in Aqueous Solution. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 120, 4114-4124 (2016). journal IF: 3.177
- 24) A. Serva A., V. Migliorati, A. Lapi, P. D'Angelo. Unveiling the complex network of interactions in Ionic Liquids: A combined EXAFS and Molecular Dynamics approach. JOURNAL OF PHYSICS. CONFERENCE SERIES, 712, 012135 (2016).
- 25) A. Serva, V. Migliorati\*, A. Lapi, G. Aquilanti, A. Arcovito, P. D'Angelo. Structural properties of geminal dicationic ionic liquid/water mixtures: a theoretical and experimental insight. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18, 16544-16554 (2016). journal IF: 4.123
- 26) F. Sessa, P. D'Angelo, L. Guidoni, V. Migliorati\*. The hidden hydration structure of halide ions: An insight into the importance of Lone Pairs. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 15729-15737 (2015). journal IF: 3.187
- 27) P. D'Angelo, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, V. Migliorati. Structural Properties and Aggregation Behaviour of 1-Hexyl-3-methylimidazolium Iodide in Aqueous Solutions. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 14515-14526 (2015). journal IF: 3.187
- 28) G. Giachin, P. Thao Mai, T. Hoa Tran, G. Salzano, F. Benetti, V. Migliorati, A. Arcovito, S. Della Longa, G. Mancini, P. D'Angelo, G. Legname. The non-octarepeat copper binding site of the prion protein is a key regulator of prion conversion. SCIENTIFIC REPORTS 5, 15253 (2015). journal IF: 5.228
- 29) V. Migliorati\*, A. Serva, G. Aquilanti, S. Pascarelli, P. D'Angelo. Local order and long range correlations in imidazolium halide ionic liquids: a combined molecular dynamics and XAS study. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 16443-16453 (2015). journal IF: 4.449
- 30) P. D'Angelo, V. Migliorati. Solvation structure of  $Zn^{2+}$  and  $Cu^{2+}$  ions in acetonitrile: A combined EXAFS and XANES study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 119, 4061-4067 (2015). journal IF: 3.187

- 31) V. Migliorati\*, P.D'Angelo. Unraveling the perturbation induced by  $Zn^{2+}$  and  $Hg^{2+}$  ions on the hydrogen bond patterns of liquid methanol. CHEMICAL PHYSICS LETTER, 633, 70-75 (2015). journal IF: 1.860
- 32) V. Migliorati\*, A. Serva, G. Aquilanti, L. Olivi, S. Pascarelli, O. Mathon, P. D'Angelo. Combining EXAFS spectroscopy and molecular dynamics simulations to understand the structural and dynamic properties of an imidazolium iodide ionic liquid. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17, 2464-2474 (2015). journal IF: 4.449
- 33) P. D'Angelo, V. Migliorati, I. Persson, G. Mancini, S. Della Longa. Quantitative analysis of deconvolved X-ray absorption near-edge structure spectra: A tool to push the limits of the X-ray absorption spectroscopy technique. INORGANIC CHEMISTRY, 53, 9778-9784 (2014). journal IF: 4.762
- 34) V. Migliorati\*, F. Sessa, G. Aquilanti, P. D'Angelo. Unraveling halide hydration: A high dilution approach. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 141, 044509 (2014). journal IF: 2.952
- 35) A. Zitolo, V. Migliorati, G. Aquilanti, P. D'Angelo. On the possibility of using XANES to investigate bromide-based ionic liquids. CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 591, 32-36 (2014). journal IF: 1.897
- 36) V. Migliorati\*, P. Ballirano, L. Gontrani, S. Materazzi, F. Ceccacci, R. Caminiti. A combined theoretical and experimental study of solid octyl and decylammonium chlorides and of their aqueous solutions. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 7806-7818 (2013). journal IF: 3.377
- 37) V. Migliorati\*, P. D'Angelo. A quantum mechanics, molecular dynamics and EXAFS investigation into the  $Hg^{2+}$  ion solvation properties in methanol solution. RSC ADVANCES, 3, 21118-21126 (2013). journal IF: 3.708
- 38) V. Migliorati\*, A. Zitolo, P. D'Angelo. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 1. MD simulations. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12505-12515 (2013). journal IF: 3.377
- 39) P. D'Angelo, A. Zitolo, G. Aquilanti, V. Migliorati\*. Using a combined theoretical and experimental approach to understand the structure and dynamics of imidazolium-based ionic liquids/water mixtures. 2. EXAFS spectroscopy. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 117, 12516-12524 (2013). journal IF: 3.377
- 40) V. Migliorati\*, M. Mancini, S. Tatoli, A. Zitolo, A. Filipponi, S. De Panfilis, A. Di Cicco, P. D'Angelo. Hydration properties of the  $Zn^{2+}$  ion in water at high pressure. INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1141-1150 (2013). journal IF: 4.794
- 41) P. D'Angelo, V. Migliorati, R. Spezia, S. De Panfilis, I. Persson, A. Zitolo. K-edge XANES investigation of octakis(DMSO)lanthanoid(III) complexes in DMSO solution and solid iodides. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 15, 8684-8691 (2013). journal IF: 4.198
- 42) V. Migliorati\*, P. Ballirano, L. Gontrani, R. Caminiti. Crystal polymorphism of hexylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 116, 2104-2113 (2012). journal IF: 3.607
- 43) V. Migliorati\*, A. Zitolo, G. Chillemi, P. D'Angelo. Influence of the second coordination shell on the XANES spectra of Zn(II) ion in water and methanol. CHEMPLUSCHEM, 77, 234-239 (2012). journal IF: 3.242 (*è riferito all'anno 2013 poiché l'IF relativo al 2012 non è disponibile*)
- 44) L. Gontrani, E. Bodo, A. Triolo, F. Leonelli, P. D'Angelo, V. Migliorati, R. Caminiti. The interpretation of diffraction patterns of two prototypical protic ionic liquids: A challenging task for classical molecular dynamics simulations. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 116, 13024-13032 (2012). journal IF: 3.607

- 45) G. Chillemi, S. De Santis, M. Falconi, G. Mancini, V. Migliorati, A. Battistoni, F. Pacello, A. Desideri, P. D'Angelo. Carbon monoxide binding to the heme group at the dimeric interface modulates structure and copper accessibility in the Cu,Zn superoxide dismutase from *Haemophilus ducreyi*: In silico and in vitro evidences. JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE AND DYNAMICS, 30, 269-279 (2012). journal IF: 2.983 (è riferito all'anno 2013 poiché l'IF relativo al 2012 non è disponibile)
- 46) V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, O. Russina, R. Caminiti. Crystal polymorphism of propylammonium chloride and structural properties of its mixtures with water. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 115, 11805-11815 (2011). journal IF: 3.696
- 47) V. Migliorati\*, G. Chillemi, P. D'Angelo. On the Solvation of the  $Zn^{2+}$  Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach. INORGANIC CHEMISTRY, 50, 8509-8515 (2011). journal IF: 4.601
- 48) V. Migliorati, P. Ballirano, L. Gontrani, A. Triolo, R. Caminiti. Thermal and structural properties of ethylammonium chloride and its mixture with water JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 115, 4887-4899 (2011). journal IF: 3.696
- 49) P. D'Angelo, A. Zitolo, V. Migliorati, G. Chillemi, M. Duvail, P. Vitorge, S. Abadie, R. Spezia. Revised Ionic Radii of Lanthanoid(III) Ions in Aqueous Solution. INORGANIC CHEMISTRY, 50, 4572-4579 (2011). journal IF: 4.601
- 50) V. Migliorati\*, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo. Effect of the  $Zn^{2+}$  and  $Hg^{2+}$  Ions on the Structure of Liquid Water. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 115, 4798-4803 (2011). journal IF: 2.946
- 51) P. D'Angelo, A. Zitolo, V. Migliorati, E. Bodo, G. Aquilanti, J. L. Hazemann, D. Testemale, G. Mancini, R. Caminiti. X-Ray absorption spectroscopy investigation of 1-alkyl-3-methylimidazolium bromide salts. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 135, 07545 (2011). journal IF: 3.333
- 52) V. Migliorati\*, G. Chillemi, G. Mancini, A. Zitolo, S. Tatoli, A. Filipponi and P. D'Angelo. Ion hydration in high-density water. JOURNAL OF PHYSICS. CONFERENCE SERIES, 190, 012057 (2009).
- 53) P. D'Angelo, V. Migliorati and L. Guidoni. Hydration Properties of the Bromide Aqua Ion: the Interplay of First Principle and Classical Molecular Dynamics, and X-ray Absorption Spectroscopy. INORGANIC CHEMISTRY, 49, 4224-4231 (2010). journal IF: 4.326
- 54) P. D'Angelo, A. Zitolo, V. Migliorati and I. Persson. Analysis of the Detailed Configuration of Hydrated Lanthanoid(III) Ions in Aqueous Solution and Crystalline Salts by Using K- and  $L_{3-}$  Edge XANES Spectroscopy. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 16, 684-692 (2010). journal IF: 5.476
- 55) P. D'Angelo, A. Zitolo, V. Migliorati, G. Mancini, I. Persson, G. Chillemi. Structural Investigation of Lanthanoid Coordination: a Combined XANES and Molecular Dynamics Study. INORGANIC CHEMISTRY, 48, 10239-10248 (2009). journal IF: 4.657
- 56) P. D'Angelo, V. Migliorati, G. Mancini, V. Barone and G. Chillemi. Integrated experimental and theoretical approach for the structural characterization of  $Hg^{2+}$  aqueous solutions. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 128, 084502 (2008). journal IF: 3.149
- 57) G. Mancini, N. Sanna, V. Barone, V. Migliorati, P. D'Angelo and G. Chillemi. Structural and Dynamical Properties of the  $Hg^{2+}$  Aqua Ion: A Molecular Dynamics Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 112, 4694-4702 (2008). journal IF: 4.189

58) P. D'Angelo, V. Migliorati, G. Mancini and G. Chillemi. A Coupled Molecular Dynamics and XANES Data Analysis Investigation of Aqueous Cadmium(II). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 112, 11833-11841 (2008). journal IF: 2.871

59) P. D'Angelo, A. Zitolo, V. Migliorati and N. V. Pavel. Measurement of X-ray multielectron photoexcitations at the I<sup>-</sup> K edge. PHYSICAL REVIEW B, 78, 144105 (2008). journal IF: 3.322

60) P. D'Angelo, A. Lapi, V. Migliorati, A. Arcovito, M. Benfatto, O.M. Roscioni, W. Mayer- Klaucke and S. Della Longa. X-ray Absorption Spectroscopy of hemes and hemeproteins in solution: multiple scattering analysis INORGANIC CHEMISTRY, 47, 9905-9918 (2008). journal IF: 4.147

#### **Contributi in libri scientifici**

1) E. Bodo, V. Migliorati. Theoretical Description of Ionic Liquids In: The Structure of Ionic Liquids. 127-148, Springer. ISBN: 978-3-319-01698-6 (2014).

2) E. Bodo, V. Migliorati. "Theoretical description of Ionic Liquids." In: SCOTT HANDY (Ed.). Ionic Liquid/ book 1. Intech, ISBN: 9789533076348 (2011).