

## 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 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 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 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 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 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 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 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 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 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 di Roma "La Sapienza". Progetto di ricerca: "Una nuova classe di solventi verdi: i solventi eutettici profondi". Settore scientifico disciplinare: CHIM/02

Date	01/06/2021-09/10/2022
Posizione ricoperta	Ricercatore a tempo determinato di tipo A (RTDA) - SSD CHIM/02 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza". Nel periodo 19/03/2022-19/08/2022 il contratto è stato sospeso per maternità.
Date	10/10/2022-attualmente in corso
Posizione ricoperta	Ricercatore a tempo determinato di tipo B (RTDB)- SSD CHIM/02 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università 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 (CHEM-02/A ex CHIM/02) (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 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 di Roma "La Sapienza" con la votazione di 110/110 e Lode. Titolo della tesi: "Studio strutturale e dinamico di soluzioni acquose di Hg <sup>2+</sup> e Cd <sup>2+</sup> 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, ORCA, GROMACS, CPMD, DL\_POLY).

## 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 Br<sup>-</sup>". 16-17 Giugno 2010. Università "La Sapienza". Roma.

"Quinto Convegno Giovani Chimici". Presentazione di un poster dal titolo: "Effetto degli ioni Zn<sup>2+</sup> e Hg<sup>2+</sup> 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.

Invited Speaker al congresso Internazionale "Catalysis-2024". Presentazione di un contributo orale su invito dal titolo: "High catalytic activity of metal complexes: a structural insight into metal ion coordination geometries". 23-24 Settembre 2024. Evento online.

## 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  $\text{Ce}^{III}$  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 didattica

Date	a.a. 2023/2024 - 2024/2025
Attività	Il semestre: Titolare dell'insegnamento di "Termodinamica Statistica" per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica (3 CFU: 24 ore frontali) presso l'Università di Roma "La Sapienza".
Date	a.a. 2022/2023 - 2023/2024 - 2024/2025
Attività	I semestre: Titolare dell'insegnamento di "Spettroscopia dei Sistemi Biologici" per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica (5 CFU: 40 ore frontali) presso l'Università di Roma "La Sapienza".
Date	a.a. 2020/2021 - 2021/2022 - 2022/2023 - 2023/2024 - 2024/2025
Attività	I semestre: Titolare dell'insegnamento di "Metodologia NMR in Chimica Analitica con Laboratorio" (attualmente "Metodologia NMR in Chimica Analitica") per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica (5+1 CFU: 40 ore frontali + 12 ore di esercitazioni) presso l'Università 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 (3 CFU: 12 ore frontali) presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma "La Sapienza".
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 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 di Roma "La Sapienza".

## Attività come Relatrice di Tesi

Date	Ottobre 2021 - Dicembre 2022
Attività	Supervisione della studentessa Eleonora de Santis per la sua tesi di Laurea magistrale in Chimica Analitica presso l'Università "La Sapienza". Titolo della tesi: "Studio delle proprietà di coordinazione dello ione $Pb^{2+}$ in soluzione acquosa e in liquidi ionici".
Date	Marzo 2024 - Dicembre 2024

Attività	Supervisione della studentessa Ginevra Murano per la sua tesi di Laurea magistrale in Chimica presso l'Università "La Sapienza". Titolo della tesi: "Studio delle proprietà strutturali e dinamiche dell'enzima ornitina decarbossilasi attraverso simulazioni di Dinamica Molecolare".
Date	Marzo 2024 - Dicembre 2024
Attività	Supervisione dello studente Luca Bertagnin per la sua tesi di Laurea magistrale in Chimica presso l'Università "La Sapienza". Titolo della tesi: "Studio computazionale del meccanismo di adsorbimento di PFAS su nanoplastiche di polipropilene".
Date	Marzo 2024 - Marzo 2025
Attività	Supervisione della studentessa Felicita Cattivera per la sua tesi di Laurea magistrale in Chimica presso l'Università "La Sapienza". Titolo della tesi: "Effetto della mutazione dell'istone H2BE76K associata al cancro sulla struttura e stabilità del nucleosoma: uno studio di Dinamica Molecolare".
Date	Marzo 2025 - ancora in corso
Attività	Supervisione della studentessa Alice Patta per la sua tesi di Laurea magistrale in Chimica presso l'Università "La Sapienza". Argomento della tesi: "Studio dell'attività enzimatica della proteina lipasi immobilizzata su ossido di grafene tramite simulazioni di Dinamica Molecolare".
Date	Marzo 2024 - Dicembre 2024
Attività	Supervisione della studentessa Elisa Marano per la sua tesi di Laurea Triennale in Scienze Chimiche presso l'Università "La Sapienza". Titolo della tesi: "Studi di Dinamica Molecolare sullo scambio di legami idrogeno in acqua: il meccanismo concertato di rottura e formazione tramite ampi salti angolari".

### **Partecipazione a commissioni per il rilascio del titolo di studio**

Date	2021-ancora in corso
Attività	Membro di commissioni di laurea dei Corsi di Laurea Magistrale in Chimica e Chimica Analitica presso l'Università "La Sapienza".
Date	2021-ancora in corso
Attività	Membro di commissioni di laurea del Corso di Laurea Triennale in Scienze Chimiche presso l'Università "La Sapienza".

### **Partecipazione a commissioni d'esame**

Date	2021-ancora in corso
Attività	Partecipazione a commissioni per gli esami di profitto sia in qualità di presidente (per i corsi a lei affidati) sia come componente delle commissioni per i corsi in condivisione o per i corsi di altri docenti.

### **Partecipazione scientifica a progetti di ricerca**

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.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2021 - Protocollo: RM12117A33BCD47C. Fondi assegnati: 14800 euro. Titolo: "Exploring Proton Transfer in Biocompatible Protic Ionic Liquids with Computational Methods." Ruolo ricoperto: Partecipante.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2022 - Protocollo: RG1221815C85AF91. Fondi assegnati: 47000 euro. Titolo: "Dissipative Systems Driven by the Decarboxylation of Fuel Acids." Ruolo ricoperto: Partecipante.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2022 - grant HP10CUZ9JQ "Deep eutectic solvents for sustainable extraction of micronutrients from agri-processing waste" 32000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2022-2023 - grant HP10CA7UEG "Unraveling the coordination properties of Pb(2+) in aqueous and ionic liquid media" 32000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

PROGETTI di RICERCA Università La Sapienza 2023 - Protocollo: RG123188B163C1B6. Fondi assegnati: 46220. Titolo: "MOF-MTM: accelerating the development of Metal-Organic Frameworks for the direct and sustainable Methane To Methanol conversion." Ruolo ricoperto: Partecipante.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2023-2024 - grant HP10CWCTLD "An insight into the peculiar properties of Deep Eutectic Solvents and their incredibly low melting point". 80000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

Scrittura del PROGETTO di RICERCA Università La Sapienza 2024 - Protocollo: RM12419059B03352. Fondi richiesti: 12000 euro. Titolo: "The coordination chemistry of lanthanides in hydrophobic eutectic solvents: a combined experimental and theoretical investigation". Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2024-2025 - grant HP10C5C0YL "Effect of cancer-associated mutations of histones on the structure and stability of the nucleosome". 100000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

Risorse computazionali ISCRA-CINECA Anno: 2025 - grant HP10CZCTEF "A Molecular Dynamics study of Ornithine decarboxylase from Leishmania infantum: a key enzyme in the polyamine and trypanothione metabolisms". 80000 ore calcolo assegnate. Ruolo ricoperto: Responsabile scientifico.

## Attività di Formazione

Date	Gennaio 2023
Attività	Partecipazione agli incontri formativi sulle Safe Zones che hanno coinvolto le Facoltà di Medicina e Psicologia e di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali dell'Università "La Sapienza". Conseguimento della certificazione di Safe Zone.
Date	2023-ancora in corso
Attività	Partecipazione alla VI edizione del corso di formazione Qualità e Innovazione della Didattica (QUID) organizzato dall'Università "La Sapienza".
Date	16 Febbraio 2024
Attività	Partecipazione al Tutorial di formazione permanente del personale docente organizzato dall'Università "La Sapienza" "Buone prassi e linee guida per gli studenti con disabilità e DSA".
Date	4 Febbraio 2025
Attività	Partecipazione al Tutorial di formazione permanente del personale docente organizzato dall'Università "La Sapienza" "Piattaforme informatiche per una didattica efficace".
Date	28 Febbraio 2025
Attività	Partecipazione al Tutorial di formazione permanente del personale docente organizzato dall'Università "La Sapienza" "Pratiche didattiche per l'apprendimento attivo".

## Attività di Terza Missione

Date	2021
Attività	Partecipazione nell'ambito del PCTO (Percorsi per le Competenze Trasversali e l'Orientamento) al Progetto "Raccontare la scienza". Il Progetto si inserisce nell'iniziativa ShareScience promossa dalla Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali della Sapienza.

## Attività organizzative e altri ruoli istituzionali

Date	2009
Incarico	Rappresentante dei Dottorandi di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza".
Date	2011-2018
Incarico	Rappresentante degli Assegnisti di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza".
Date	2021-ancora in corso
Incarico	Membro del Comitato Pari Opportunità del Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza".
Date	Luglio 2023
Incarico	Membro della Commissione per l'esame di ammissione al corso di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche dell'Università "La Sapienza" - 39° ciclo.
Date	2023-ancora in corso
Incarico	Referente per la pianificazione dell'orario degli insegnamenti del Corso di Studio in Scienze Chimiche (L-27), del Corso di Studio in Chimica (LM-54) e del Corso di Studio in Chimica Analitica (LM-54) dell'Università "La Sapienza".
Date	2023-ancora in corso
Incarico	Membro della Commissione di Gestione della Assicurazione della Qualità (CGAQ) del Corso di Studio in Scienze Chimiche (L-27), del Corso di Studio in Chimica (LM-54) e del Corso di Studio in Chimica Analitica (LM-54) dell'Università "La Sapienza". Nell'ambito dei lavori di questa commissione si è occupata della compilazione del Rapporto di Riesame Ciclico e delle Schede di Monitoraggio Annuali.
Date	2024-ancora in corso
Incarico	Membro del collegio dei docenti del Dottorato in Scienze Chimiche dell'Università "La Sapienza".
Date	2024-ancora in corso
Incarico	Membro della Commissione di gestione dell'Assicurazione della Qualità del Corso di Dottorato (CGAQ-Ph) in Scienze Chimiche dell'Università "La Sapienza".

## Attività come Revisore

Date	2012-ancora in corso
Attività	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, Chemical Engineering Science, Journal of Molecular Liquids, Catalysis Science & Technology, Nanoscale, Journal of Chemical Information and Modeling, Journal of Computational Chemistry e Angewandte Chemie.
Date	2021-2023
Attività	Valutazione di progetti di ricerca da svolgersi presso il sincrotrone SSRL (Stanford Synchrotron Radiation Lightsource).

## Attività Editoriali

Date	2022-2023
Attività	Editor del Research Topic "Solvation Effects of Organic Reactions in Ionic Liquids, Deep Eutectic Solvents, and Conventional Solvents", <i>Frontiers in Chemistry</i> (2023)- in collaborazione con Ranjan Dey, Paola Campodonico, Ricardo A. Tapia.
Date	2021-ancora in corso
Attività	Editor della rivista internazionale <i>Materials</i> pubblicata da MDPI.

## Attività di Ricerca pre-contratto RTDB

### Studio di sistemi disordinati

L'attività di ricerca si è incentrata per molti anni 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. Tale attività di ricerca si è interamente svolta nell'ambito della partecipazione al gruppo di ricerca coordinato dalla Prof.ssa Paola D'Angelo. Gli interessi scientifici in questo ambito hanno abbracciato 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. 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. Tali geometrie spesso risultano molto difficili da 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.

## **Attività di Ricerca nel periodo del contratto come RTDB**

### **Studio di sistemi disordinati**

In qualità di RTD-B ha portato avanti la linea di ricerca relativa allo studio di sistemi disordinati tramite simulazioni di Dinamica Molecolare e spettroscopia di assorbimento dei raggi X, dedicandosi in particolare allo studio dello ione  $Hg^{2+}$  in acetonitrile, dello ione  $Pb^{2+}$  in acqua e allo studio delle interazioni di legame idrogeno che si formano in soluzione acquosa di ioni alogenuro attraverso procedure innovative di analisi basate sull'utilizzo dei lone pair. In questo ambito, ha proposto un nuovo modello di idratazione per il cloruro e lo ioduro che supera i limiti del modello radiale convenzionalmente utilizzato. Ha inoltre studiato la struttura e le proprietà di solventi ad eutettico profondo (DES dall'inglese Deep Eutectic Solvents) e attraverso il confronto delle proprietà strutturali di diversi DES ha messo in luce aspetti importanti sulla driving force che porta alla formazione di questa peculiare classe di solventi.

### **Studio di sistemi biologici**

Una nuova linea di ricerca avviata da Valentina Migliorati nel periodo del contratto come RTDB riguarda lo studio di sistemi biologici attraverso la Dinamica Molecolare classica in combinazione con diverse tecniche sperimentali che includono la cristallografia ai raggi X, la microscopia crioelettronica e la diffrazione dei raggi X a basso angolo. In particolare, in collaborazione con il gruppo della Prof.ssa Annarita Fiorillo del Dipartimento di Scienze Biochimiche dell'Università "La Sapienza" e con il ricercatore del CINECA Alessandro Grottesi, ha studiato le proprietà strutturali e dinamiche di una proteina, l'ornitina decarbossilasi (ODC), che svolge un ruolo chiave nella biosintesi delle poliammine e rappresenta un ottimo target per lo sviluppo di farmaci contro le malattie causate dai tripanosomatidi come la leishmaniosi e la tripanosomiasi.

La nuova linea di ricerca di Valentina Migliorati che coinvolge lo studio di sistemi biologici si è inoltre incentrata, in collaborazione con il ricercatore del CINECA Alessandro Grottesi, sullo studio di mutazioni di istoni all'interno dei nucleosomi che portano ad una maggiore inclinazione allo sviluppo del cancro. Lo studio attraverso la Dinamica Molecolare classica del nucleosoma wild type e di nucleosomi mutati ha permesso di mettere in luce gli effetti delle mutazioni sulla struttura, la dinamica e la stabilità del nucleosoma, supportando l'ipotesi che la mutazione possa influenzare la funzione regolatoria del nucleosoma, rendendolo più accessibile ai fattori di trascrizione e ad altri complessi proteici coinvolti nella regolazione dell'espressione genica.

### **Studio di sostanze perfluoroalchiliche**

Una nuova linea di ricerca sviluppata nel periodo del contratto come RTDB da Valentina Migliorati in collaborazione con il gruppo del Prof. Franco Mazzei del Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università "La Sapienza" e in collaborazione con diversi ricercatori del Laboratorio per l'analisi dei microinquinanti organici della Società Acea, riguarda lo studio del meccanismo di adsorbimento delle sostanze perfluoroalchiliche (PFAS dall'inglese perfluoroalkyl substances) su nanoplastiche di polipropilene. Sia i PFAS che le nanoplastiche sono contaminanti di interesse emergente responsabili dell'inquinamento dell'acqua e del suolo e rappresentano quindi un rischio significativo sia per l'ambiente che per la popolazione. In particolare, nell'ambito di questa nuova linea di ricerca, Valentina Migliorati si è dedicata in un primo momento allo studio del meccanismo di adsorbimento del PFOS, che è uno dei composti più diffusi in matrici acquose, su nanoparticelle di polipropilene attraverso metodi computazionali basati su calcoli ab initio che utilizzano la teoria del funzionale densità e diverse tecniche sperimentali. Ha esteso poi lo studio computazionale dei PFAS adsorbiti su nanoplastiche di polipropilene ad una molteplicità di composti perfluoroalchilici al variare delle caratteristiche di questi, in particolare della lunghezza e ramificazione della catena e del gruppo di testa (carbossile e solfonato). Per questo studio, in collaborazione con il Prof. Enrico Bodo del Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza", è stata messa a punto una procedura computazionale ad hoc che ha permesso di ottenere risultati molto accurati sui sistemi studiati.

## Principali Collaborazioni pre-contratto RTDB

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 Modelisation 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**, ex-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.

## Nuove Collaborazioni avviate nel periodo del contratto come RTDB

Durante il contratto da RTDB sono state avviate diverse collaborazioni scientifiche, finalizzate allo sviluppo di nuove linee di ricerca:

Prof.ssa **Annarita Fiorillo** del Dipartimento di Scienze Biochimiche dell'Università "La Sapienza" e Dott. **Alessandro Grottesi** del CINECA. Studio della proteina ornitina decarbossilasi (ODC), come target per lo sviluppo di farmaci contro la leishmaniosi.

Dott. **Alessandro Grottesi** del CINECA. Studio di mutazioni di istoni all'interno dei nucleosomi che portano ad una maggiore inclinazione allo sviluppo del cancro.

Gruppo di ricerca del Prof. **Franco Mazzei** del Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco dell'Università "La Sapienza". Studio di sostanze perfluoroalchiliche.

**Marco Mancini**, **Valentina Gioia** e **Alessandro Frugis** del Laboratorio per l'analisi dei microinquinanti organici della Società Acea. Studio di sostanze perfluoroalchiliche.

Dott.ssa **Federica Simonetti**, Dipartimento di Scienze e Ingegneria della Materia, dell'Ambiente e dell'Urbanistica, Università Politecnica delle Marche. Studio di sostanze perfluoroalchiliche.

Prof. **Enrico Bodo** del Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza". Sviluppo di una metodologia computazionale per lo studio del meccanismo di adsorbimento di sostanze perfluoroalchiliche su nanoplastiche di polipropilene.

Prof.ssa **Cleofe Palocci** e Dott.ssa **Laura Chronopoulou** del Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza". Studio dell'attività enzimatica della proteina lipasi libera e immobilizzata su ossido di grafene.

## Indicatori Bibliometrici

Numero totale di articoli	70
Hirsch (H) index	33
Numero totale di citazioni	2262
Citazioni medie per articolo	32.3 (dati Scopus)
Impact factor totale	281.085
Impact factor medio	4.195

## 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) F. Simonetti, M. Mancini, V. Gioia, R. Zumpano, F. Mazzei, A. Frugis, V. Migliorati\*. Unveiling the adsorption mechanism of perfluorooctane sulfonate onto polypropylene nanoplastics: A combined theoretical and experimental investigation WATER RESEARCH 278, 123324 (2025). journal IF:11.5

2) A. Pierini, V. Migliorati, J.L. Gomez-Urbano, A. Balducci, S. Brutti, E. Bodo. Simulations of  $\gamma$ -Valerolactone Solvents and Electrolytes for Lithium Batteries Using Polarizable Molecular Dynamics. MOLECULES, 30, 230 (2025). journal IF:4.2

3) V. Migliorati\*, P. D'Angelo. How does the cation nature affect the DES structure? CHEMICAL PHYSICS LETTERS 858, 141731, (2025). journal IF:2.8

4) V. Migliorati\*, E. De Santis, P. D'Angelo. Does  $Pb^{2+}$  Form Holodirected or Hemidirected Solvation Geometries in Water? THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 128, 11748-11758 (2024). journal IF:2.8

5) V. Migliorati\*, P. D'Angelo, F. Sessa. Going beyond Radial Hydration Models: The Hidden Structures of Chloride and Iodide Aqua Ions Revealed by the Use of Lone Pairs. THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 127, 10843-10850 (2023). journal IF:2.8

6) V. Migliorati\*, P. D'Angelo. On the formation of inner-sphere solvation complexes in dilute acetonitrile solutions of the  $Hg(NO_3)_2$  and  $Hg(TfO)_2$  salts: a Molecular Dynamics study RESULTS IN CHEMISTRY, 6, 101202 (2023). journal IF:2.3

7) F. Sessa, M. Busato, C. Meneghini, V. Migliorati, A. Lapi, P. D'Angelo. Evolution of the La(III) ion coordination sphere in ethylammonium nitrate solution upon water addition JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS 388 122771 (2023). journal IF:5.3

8) P. D'Angelo, V. Migliorati\*, A. Gibiino, M. Busato. Direct Observation of Contact Ion-Pair Formation in  $La^{3+}$  Methanol Solution INORGANIC CHEMISTRY, 61, 17313-17321 (2022). journal IF:4.6

9) V. Migliorati\*, M. Busato, P. D'Angelo. Solvation structure of the  $Hg(NO_3)_2$  and  $Hg(TfO)_2$  salts in dilute aqueous and methanol solutions: An insight into the  $Hg^{2+}$  coordination chemistry JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 363, 119801 (2022). journal IF:6.0

10) V. Migliorati, A. Del Giudice, A. Casu, A. Falqui, A. Podestà, P. Milani, F. Borghi. Crystalline Structuring of Confined Ionic Liquids at Room Temperature JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 126, 13477-13484 (2022). journal IF:3.7

- 11) M. Busato, G. Mannucci, V. Di Lisio, A. Martinelli, A. Del Giudice, A. Tofoni, C. Dal Bosco, V. Migliorati, A. Gentili, P. 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:8.4
- 12) 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:6.633
- 13) 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, 60, 10674-10685 (2021). journal IF:5.436
- 14) 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:2.719
- 15) 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:6.633
- 16) 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:3.945
- 17) 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:9.224
- 18) V. Migliorati\*, A. Lapi, Paola D'Angelo. Unraveling the solvation geometries of the lanthanum(iii) bistriflimide salt in ionic liquid/acetoneitrile mixtures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 22, 20434-20443 (2020). journal IF:3.676
- 19) M. Busato, A. Melchior, V. Migliorati, A. Colella, I. Persson, G. Mancini, D. Veciani, 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
- 20) 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
- 21) 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
- 22) 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, 2,10001 (2019). journal IF: non disponibile
- 23) 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

- 24) F. Sessa, V. Migliorati\*, A. Serva, A. Lapi, G. Aquilanti, G. Mancini, P. D'Angelo. On the coordination of  $Zn^{2+}$  ion in  $Tf_2N^-$  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
- 25) 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
- 26) F. Sessa, V. Migliorati, A. Lapi, P. D'Angelo.  $Ce^{3+}$  and  $La^{3+}$  ions in ethylammonium nitrate: A XANES and molecular dynamics investigation CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 706, 311-316 (2018). journal IF:1.901
- 27) V. Migliorati\*, A. Filipponi, 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
- 28) 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
- 29) 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
- 30) 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
- 31) 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
- 32) 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
- 33) 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
- 34) 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).
- 35) 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
- 36) 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
- 37) 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

- 38) 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
- 39) 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
- 40) 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
- 41) 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 LETTERS*, 633, 70-75 (2015). journal IF: 1.860
- 42) 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
- 43) 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
- 44) 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
- 45) 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
- 46) 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
- 47) 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
- 48) 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
- 49) 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
- 50) 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
- 51) 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

- 52) 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
- 53) 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*)
- 54) 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
- 55) 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*)
- 56) 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
- 57) V. Migliorati\*, G. Chillemi, P. D'Angelo. On the Solvation of the Zn<sup>2+</sup> Ion in Methanol: A Combined Quantum Mechanics, Molecular Dynamics, and EXAFS Approach. INORGANIC CHEMISTRY, 50, 8509-8515 (2011). journal IF: 4.601
- 58) 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
- 59) 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
- 60) V. Migliorati\*, G. Mancini, G. Chillemi, A. Zitolo, P. D'Angelo. Effect of the Zn<sup>2+</sup> and Hg<sup>2+</sup> ions on the Structure of Liquid Water. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 115, 4798-4803 (2011). journal IF: 2.946
- 61) 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
- 62) 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).
- 63) 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
- 64) 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<sub>3</sub>-Edge XANES Spectroscopy. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 16, 684-692 (2010). journal IF: 5.476

- 65) 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
- 66) P. D'Angelo, V. Migliorati, G. Mancini, V. Barone and G. Chillemi. Integrated experimental and theoretical approach for the structural characterization of  $\text{Hg}^{2+}$  aqueous solutions. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 128, 084502 (2008). journal IF: 3.149
- 67) G. Mancini, N. Sanna, V. Barone, V. Migliorati, P. D'Angelo and G. Chillemi. Structural and Dynamical Properties of the  $\text{Hg}^{2+}$  Aqua Ion: A Molecular Dynamics Study. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*, 112, 4694-4702 (2008). journal IF: 4.189
- 68) 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
- 69) P. D'Angelo, A. Zitolo, V. Migliorati and N. V. Pavel. Measurement of X-ray multielectron photoexcitations at the  $\text{I}^-$  K edge. *PHYSICAL REVIEW B*, 78, 144105 (2008). journal IF: 3.322
- 70) 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).

Roma 23/04/2025