

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PADOVA

Procedura valutativa per la chiamata di un Professore di seconda fascia presso il Dipartimento di Scienze Chimiche per il settore concorsuale 03/B1 fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi inorganici (profilo: settore scientifico disciplinare CHIM/03), ai sensi dell'art. 24, comma 5, Legge 30 dicembre 2010, n. 240 - 2023PA558

VERBALE N. 2

Il giorno 16/01/2024 alle ore 15:00 la Commissione giudicatrice della procedura valutativa di cui sopra composta da:

Prof. Stefano Agnoli	professore di prima fascia presso l'Università degli Studi di Padova
Prof. Francesco Sedona	professore di seconda fascia presso l'Università degli Studi di Padova
Prof. Cristina Tubaro	professore di seconda fascia presso l'Università degli Studi di Padova

si riunisce presso il Dipartimento di Scienze Chimiche per procedere, in conformità ai criteri formulati nel verbale n. 1, alla valutazione della candidata Dott.ssa Silvia Carlotto.

La commissione è entrata all'interno della Piattaforma informatica 'Pica' nella sezione riservata alla Commissione e ha visualizzato la documentazione presentata per la valutazione ai fini dell'immissione nella fascia dei professori associati.

Per i lavori in collaborazione la commissione rileva quanto segue:

Nessun membro della commissione ha lavori in collaborazione con la candidata presentati ai fini della presente selezione

Per i lavori in collaborazione con terzi la Commissione *rileva* che i contributi scientifici della candidata sono enucleabili e distinguibili e unanimemente delibera di *ammettere* alla successiva valutazione di merito i seguenti lavori:

1. Cojocariu, S. Carlotto, D. Baranowski, M. Jugovac, J. Dreiser, L. Schio, L. Floreano, M. Casarin, V. Feyer, C.M. Schneider, "Extended π -Conjugation: a Key to Magnetic Anisotropy Preservation in Highly Reactive Porphyrins", The Journal of Material Chemistry C, 2023, 11, 115521-115530.
2. L. Bellucci, L. Babetto, G. Bottaro, S. Carlotto, L. Labella, E. Gallo, F. Marchetti, S. Samaritani, L. Armelao, "Competing excitation paths in Luminescent Heterobimetallic Lanthanide-Aluminium complexes: unravelling interactions via experimental and theoretical investigations", iScience, 2023, 26, 106614 (1-21).
3. S. Carlotto, M. M. Natile, A. Glisenti, A. Vittadini, "Adsorption of small molecules at the cobalt-doped SrTiO₃ (001) surface: A first-principles investigation", Surface Science, 2015, 633, 68-76.
4. F. Todescato, I. Fortunati, S. Carlotto, C. Ferrante, L. Grisanti, C. Sissa, A. Painelli, A. Colombo, C. Dragonetti, D. Roberto, "Dimers of polar chromophores in solution: role of excitonic interactions one- and two-photon absorption properties", Physical Chemistry Chemical Physics, 2011, 13, 11099-11109.
5. S. Carlotto, P. Cimino, M. Zerbetto, L. Franco, C. Corvaja, M. Crisma, F. Formaggio, C. Toniolo, A. Polimeno, V. Barone, "Unraveling Solvent-Driven

- Equilibria between α - and β -Helices through an Integrated Spin Labeling and Computational Approach”, *Journal of American Chemical Society*, 2007, 129, 11248-11258.
6. S. Carlotto, A. Verdini, G. Zamborlini, I. Cojocariu, V. Feyer, L. Floreano, M. Casarin, “A Local Point of View of the Cu(100) \rightarrow NiTPP Charge Transfer at the NiTPP/Cu(100) interface”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, 25, 26779-26786.
 7. M. Rancan, M. Rando, L. Bosi, A. Carlotto, R. Seraglia, J. Tessarolo, S. Carlotto, G. H. Clever, L. Armelao, “Dynamic lanthanide exchange between quadruple-stranded cages: the effect of ionic radius differences on kinetics and thermodynamics”, *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2022, 9, 4495-4505.
 8. I. Cojocariu, S. Carlotto, M. Jugovac, L. Foreano, M. Casarin, V. Feyer, C. M. Schneider, “Distortion-driven spin switching in electron-doped metal porphyrins”, *The Journal of Materials Chemistry C*, 2022, 10, 9748-9757.
 9. S. Carlotto, I. Cojocariu, V. Feyer, L. Floreano, M. Casarin, “The Magnetic Behaviour of CoTPP Supported on Coinage Metal Surfaces in the Presence of Small Molecules: A Molecular Cluster Study of the Surface trans-Effect”, *Nanomaterials*, 2022, 12, 218 (1-16).
 10. S. Carlotto, L. Armelao, M. Rancan, “Helicate versus Mesocate in Quadruple-Stranded Lanthanide Cages: A Computational Insight”, *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, 23, 10619 (1-15).
 11. S. Carlotto, “The catalytic performance of pure, doped, and reduced-doped SrTiO₃ perovskite surfaces for oxidative coupling of methane”, *Applied Surface Science*, 2022, 602, 154376 (1-8).
 12. M. Rancan, J. Tessarolo, A. Carlotto, S. Carlotto, M. Rando, L. Barchi, E. Bolognesi, R. Seraglia, G. Bottaro, M. Casarin, G. H. Clever, L. Armelao, “Adaptive helicity and chiral recognition in bright Europium quadruple-stranded helicates induced by host-guest interaction”, *Cell Report Physical Science*, 2022, 3, 100692.
 13. S. Carlotto, L. Babetto, M. Bortolus, A. Carlotto, M. Rancan, G. Bottaro, L. Armelao, D. Carbonera, M. Casarin, “Nature of the Ligand-Centered Triplet State in Gd³⁺ β -Diketonate Complexes as Revealed by Time-Resolved EPR Spectroscopy and DFT Calculations”, *Inorganic Chemistry*, 2021, 60, 15141–15150.
 14. I. Cojocariu, S. Carlotto, G. Zamborlini, M. Jugovac, L. Schio, L. Floreano, M. Casarin, V. Feyer, C. M. Schneider, “Reversible redox reactions in metal-supported porphyrin: the role of spin and oxidation state”, *The Journal of Materials Chemistry C*, 2021, 9, 12559–12565.
 15. S. Carlotto, J. D. Fuhr, A. Cossaro, A. Verdini, M. Casarin, M. Lingenfelder, J. E. Gayone, L. Floreano, H. Ascolani, “Stabilization of high-spin Mn ions in tetrapyrrolic configuration on copper”, *Applied Surface Science*, 2021, 551, 149307 (1-7).
 16. L. Babetto, S. Carlotto, A. Carlotto, M. Rancan, G. Bottaro, L. Armelao, M. Casarin, “Multireference Ab Initio Investigation on Ground and Low-Lying Excited States: Systematic Evaluation of J–J Mixing in a Eu³⁺ Luminescent Complex”, *Inorganic Chemistry*, 2021, 60, 315-324.
 17. I. Cojocariu, S. Carlotto, H. M. Sturmeit, G. Zamborlini, M. Cinchetti, A. Cossaro, A. Verdini, L. Floreano, M. Jugovac, P. Puschnig, C. Piamonteze, M. Casarin, V. Feyer, C. M. Schneider, “Ferrous to ferric transition in Fe-phthalocyanine driven by NO₂ exposure”, *Chemistry – A European Journal*, 2021, 27, 3526-3535.

18. L. Babetto, S. Carlotto, A. Carlotto, M. Rancan, G. Bottaro, L. Armelao, M. Casarin, "Antenna triplet DFT calculations to drive the design of luminescent Ln³⁺ complexes", *Dalton Transactions*, 2020, 49, 14556-14563.
19. P. Machaín, J.D. Fuhr, S. Schneider, S. Carlotto, M. Casarin, A. Cossaro, A. Verdini, L. Floreano, M. Lingenfelder, J.E. Gayone, H. Ascolani, "Mn-Cu Transmetalation as a Strategy for the Assembly of Decoupled Metal-organic Networks on Sn/Cu(001) Surface Alloys", *The Journal of Physical Chemistry C*, 2020, 124, 35, 18993–19002.
20. S. Carlotto, "The role of the dopant and structural defects on the water absorption and on the H₂ formation in the Al, Co and Cu doped SrTiO₃ perovskite steps", *Applied Surface Science*, 2020, 527, 146850 (1-7).
21. S. Carlotto, A. Glisenti, A. Vittadini, M. Casarin, "Adsorption and reactivity of CO at a stepped SrTiO₃(1 0 0) surface in the presence of Cu impurities", *Applied Surface Science*, 2020, 521, 146450 (1-5).
22. S. Carlotto, G. Casella, L. Floreano, A. Verdini, A.P.C. Ribeiro, L.M.D.R.S. Martins, M. Casarin, "Spin State, Electronic Structure and Bonding on C-Scorpionate [Fe(II)Cl₂(tpm)] Catalyst: an Experimental and Computational study", *Catalysis Today*, 2020, 358, 403-411.
23. S. Carlotto, P. Finetti, M. de Simone, M. Coreno, G. Casella, M. Sambì, M. Casarin, "Comparative Experimental and Theoretical Study of the C and O K-edge X-ray Absorption Spectroscopy in Three Highly Popular, Low Spin Organoiron Complexes ([Fe(CO)₅], [(η⁵-C₅H₅)Fe(CO)(μ-CO)]₂ and [(η⁵-C₅H₅)₂Fe])", *Inorganic Chemistry*, 2019, 58, 16411-16423.
24. S. Carlotto, P. Finetti, M. de Simone, M. Coreno, G. Casella, M. Sambì, M. Casarin, "Comparative Experimental and Theoretical Study of the Fe L_{2,3}-Edges X-ray Absorption Spectroscopy in Three Highly Popular, Low-Spin Organoiron Complexes: [Fe(CO)₅], [(η⁵-C₅H₅)Fe(CO)(μ-CO)]₂, and [(η⁵-C₅H₅)₂Fe]", *Inorganic Chemistry*, 2019, 58, 5844-5857.
25. S. Carlotto, M. Sambì, M. Rancan, M. Casarin, "A Theoretical Investigation of the Electronic Properties of Three Vanadium Phthalocyaninato (Pc) Based Complexes: PcV, PcVO, and PcVI", *Inorganic Chemistry*, 2018, 57, 1859-1869.
26. S. Carlotto, M. M. Natile, A. Glisenti, A. Vittadini, "Mechanisms of NO Reduction in a CO–NO Atmosphere at Co- and Cu-Doped SrTiO₃(100) Surfaces", *The Journal of Physical Chemistry C*, 2018, 122, 449-454.
27. S. Carlotto, L. Floreano, A. Cossaro, M. Dominguez, M. Rancan, M. Sambì, M. Casarin, "The electronic properties of three popular high spin complexes [TM(acac)₃, TM = Cr, Mn, and Fe] revisited: an experimental and theoretical study", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2017, 19, 24840-24854.
28. S. Carlotto, A. Glisenti, M. M. Natile, J.-F. Paul, D. Blanck, A. Vittadini, "Energetics of CO Oxidation on Lanthanide-free Perovskite Systems: the case of Co-doped SrTiO₃", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18, 33282-33286.
29. S. Carlotto, M. M. Natile, A. Glisenti, A. Vittadini, "Adsorption of CO and formation of carbonates at steps of pure and Co-doped SrTiO₃ surfaces by DFT calculations", *Applied Surface Science*, 2016, 364, 522-527.
30. S. Carlotto, M. Casarin, A. Lanza, F. Nestola, L. Pandolfo, C. Pettinari, R. Scatena, "Reaction of Copper(II) Chloroacetate with Pyrazole. Synthesis of a 1D Coordination Polymer and Unexpected Dehydrochlorination Reaction", *Crystal Growth & Design*, 2015, 15, 5910-5918.

La commissione esprime un giudizio complessivo relativamente agli elementi indicati nel verbale 1: **A) Pubblicazioni scientifiche; B) Attività didattica; C) Attività di ricerca, attività istituzionali, organizzative, gestionali e di servizio; D) Attività di terza missione;**

A) Pubblicazioni scientifiche: La Dott.ssa Silvia Carlotto documenta un'attività scientifica di ottimo livello nell'ambito della chimica generale e inorganica e dei materiali, congruente con il profilo di professore universitario di seconda fascia nel settore concorsuale 03/B1, relativo alla presente procedura valutativa.

Durante il periodo di contratto a tempo determinato ("rtdb") di cui alla lettera b) della legge n. 240 del 30 dicembre 2010, la dott.ssa Carlotto si è dedicata all'utilizzo di metodi teorici e computazionali per lo studio di sistemi molecolari e/o di materiali al fine di determinarne e comprendere le proprietà elettroniche ottiche/magnetiche e catalitiche.

E' possibile evincere con chiarezza il contributo individuale della candidata nei lavori in collaborazione, infatti in 15 dei quali appare come autore di riferimento (corresponding author) ed in 10 come primo autore. Tutte le pubblicazioni si contraddistinguono per ottimo rigore metodologico ed originalità, e sono collocate in riviste di riferimento per la chimica computazionale ed inorganica appartenenti principalmente al primo quartile.

B) Attività didattica L'attività didattica istituzionale svolta nel triennio è stata intensa e pertinente al settore concorsuale ed include negli a.a. 2020/2021, 2021/2022, 2022/2023, 2023/2024:

1 modulo didattico 4hr "Scanning tunneling microscopy" nel dottorato Scienza ed Ingegneria dei Materiali e delle nanostrutture presso l'Università di Padova (a.a. 21/22, 22/23)

1 CFU "Didattica della chimica" nella Laurea Magistrale in chimica presso l'Università di Padova (a.a. 23/24)

2 CFU "Chimica inorganica 3" nella Laurea Magistrale in chimiche presso l'Università di Padova (a.a. 21/22, 22/23, 23/24)

4 CFU "Fondamenti di Chimica e Educazione ambientale" Laurea in Scienza della Formazione Primaria presso l'Università di Padova (a.a. 20/21, 21/22, 22/23, 23/24)

2 CFU "Laboratorio di Chimica 1" nella Laurea triennale in chimica presso l'Università di Padova (a.a. 21/22, 22/23).

La dott.ssa Carlotto ha anche svolto didattica all'estero presso l'Universitat de Valencia (8 hr computational chemistry) e l'Università di Eindhoven (Inorganic Chemistry 8 hr)

Presso l'Università di Padova, la dottoressa Carlotto è stata supervisore di 3 tesi di laurea magistrale in Scienze della formazione Primaria, co-supervisore di un dottorando del corso di dottorato in scienze molecolari e co-supervisore di uno studente di laurea magistrale in chimica.

C) Attività di ricerca, attività istituzionali, organizzative, gestionali e di servizio;

La dott.ssa Carlotto ha svolto principalmente la sua attività di ricerca presso l'Università di Padova dove ha conseguito il dottorato e dove ha svolto diversi contratti di ricerca come postdoc. I principali argomenti di ricerca perseguiti, in particolare durante l'ultimo triennio, sono stati da una parte lo studio delle proprietà ottiche magnetiche e di auto autoassemblaggio di lantanidi con applicazioni nell'energetica, nanomedicina, sensoristica e catalisi, e dall'altra delle proprietà magnetiche di complessi di metalli di transizione supportati rilevanti per la sensoristica e l'immagazzinamento delle informazioni.

La dott.ssa Carlotto ha maturato una corposa esperienza internazionale svolgendo diversi periodi come visiting professor presso l'Universitat de Valencia ES (1 mese), Università di Tokyo JP (3 mesi), Università di Eindhoven, NL (1 mese), Università di Ginevra CH (5 mesi). Ha partecipato a diversi progetti nazionali (3 PRIN, e 1 FIRB) ed internazionali (1 progetto europeo NEXGENCAT). Ha anche svolto attività di ricerca all'interno di progetti locali dell'Università di Padova (3 PRAT, 2 progetti dipartimentali progetto strategico di Ateneo HELIOS) e della fondazione CARIPARO (progetto di eccellenza MISHA). La dott.ssa Carlotto ha vinto come principal investigator alcuni progetti per mobilità e networking incluso un Seeding Fund Arqus, un progetto dipartimentale CHIRoN, un progetto ISCRA del CINECA, il finanziamento di base per attività di ricerca 2017.

La dott.ssa Carlotto ha presentato le sue ricerche come relatore su invito a 4 conferenze internazionali sui temi della spettroscopia, catalisi e chimica computazionale, ha inoltre partecipato con interventi orali a 10 congressi/workshop scientifici nazionali/internazionali. È stata anche membro del comitato scientifico di 2 congressi internazionali e nel comitato organizzatore di 6 congressi internazionali e uno nazionale.

Presso l'ateneo Patavino, la dott.ssa Carlotto ha rivestito ruoli istituzionali come referente per la scuola di scienze nella commissione di ateneo di "Orientamento e tutorato", è stata membro del collegio dei docenti della laurea in chimica e del corso di dottorato in Scienze Molecolari, membro del comitato tecnico scientifico della Comunità scientifica di chimica computazionale di Padova C3P, referente per il Dip. di Scienze Chimiche del progetto Materiali di Frontiera per usi energetici.

L'attività di ricerca della dott.ssa Carlotto, temporalmente continua e prolifica, è stata svolta in collaborazione con altri gruppi di ricerca nazionali ed internazionali, spesso di alto profilo, e complessivamente ha portato alla pubblicazione di 75 lavori (26 durante il triennio come rtdb) su riviste a diffusione internazionale di buon fattore di impatto (Journal of Materials Chemistry C, Applied Surface Science, Journal of the American Chemical Society, Cell reports in Physical Science, Inorganic Chemistry Frontiers), con una collocazione editoriale pienamente coerente con le tematiche del settore scientifico disciplinare. Complessivamente i prodotti della ricerca della dott.ssa Carlotto hanno avuto un buon impatto nella comunità scientifica internazionale ottenendo un discreto numero di citazioni, l'indice di Hirsh raggiunto è di 16.

La Dott.ssa Carlotto è in possesso dell'abilitazione scientifica nazionale per il ruolo di Professore di II fascia nel settore concorsuale 03/B1 dal 01/02/2022, in corso di validità.

D) Attività di terza missione

La dott.ssa Carlotto ha svolto attività di divulgazione scientifica ed in particolare volta alla promozione della cultura chimica nella società civile sia presso il dipartimento di Scienze Chimiche che INFM.

La dott.ssa Carlotto è anche autrice di alcuni articoli divulgativi di ambito chimico sia rivolti al pubblico generalista (Chemistry World della Royal Society of Chemistry) che alle industrie (Advanced in Engineering).

La Commissione ritiene *all'unanimità* che le pubblicazioni scientifiche, l'attività didattica, l'attività di ricerca, le attività istituzionali, organizzative, gestionali e di servizio, le attività di terza missione della Dott.ssa Silvia Carlotto siano *adeguate* alle necessità del Dipartimento e dà *esito positivo* alla immissione nel ruolo dei Professori di seconda fascia. La candidata ha raggiunto pertanto la piena maturità per ricoprire un posto di professore di seconda fascia

Il Prof. Stefano Agnoli si impegna a consegnare tutti gli atti concorsuali all'Ufficio Personale docente.

La Commissione viene sciolta alle ore 15:50.

Il presente verbale è letto e approvato seduta stante da tutti i componenti della commissione che dichiarano di concordare con quanto verbalizzato.

Padova, 16/01/2024

Il Presidente

Prof Stefano Agnoli presso l'Università degli Studi di Padova

Prof. Francesco Sedona presso l'Università degli Studi di Padova

Prof.ssa Cristina Tubaro presso l'Università degli Studi di Padova