

Assegnazione Premio Miglior Lavoro Scientifico

Il Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale è lieto di annunciare i vincitori del “Premio Miglior Lavoro Scientifico” per giovani ricercatori al di sotto dei trentacinque anni, quali autori di una ricerca originale, pubblicata su una rivista scientifica internazionale nel periodo 01 gennaio 2017 – 10 giugno 2020 e condotta in Italia nell’area dei metodi teorici e degli approcci computazionali applicati ad uno dei seguenti ambiti:

- sistemi complessi;
- sistemi innovativi;
- sviluppo metodologico.

Il Consiglio Direttivo, preso atto delle valutazioni espresse da una commissione diversa costituita per ogni premio, ha unanimemente deciso di assegnare i premi come segue:

Nell’ambito dei “sistemi complessi” il premio è conferito alla

Dott.ssa Fortuna Ponte

per il suo contributo “*Insights from Computations on the Mechanism of Reduction by Ascorbic Acid of Pt^{IV} Prodrugs with Asplatin and Its Chlorido and Bromido Analogues as Model Systems*” (Chem. Eur. J. 2018, 24, 9572), con motivazione: per il distinto contributo allo studio della reattività e delle proprietà redox di complessi di Pt(IV), che evidenzia in modo originale il ruolo cruciale della chimica quantistica nella caratterizzazione preclinica di profarmaci antitumorali.

Nell’ambito “sistemi innovativi” il premio è conferito al

Dott. Jacopo Fregoni

per il suo contributo “*Strong Coupling with Light Enhances the Photoisomerization Quantum Yield of Azobenzene*” (Chem 2020, 6, 250), con motivazione: per l'importante contributo nell'ambito dell'emergente chimica polaritonica allo sviluppo e implementazione di una strategia innovativa teorico-computazionale per trattare l'accoppiamento forte luce-materia in condizioni di nano-confinamento e capace di riprodurre l'aumento della resa quantica di una reazione chimica osservata sperimentalmente.

Nell'ambito "sviluppo metodologico" il premio è conferito *ex aequo* alla

Dott.ssa Silvia Alessandrini

per il contributo "*Extension of the "Cheap" Composite Approach to Noncovalent Interactions: The jun-ChS Scheme*" (J. Chem. Theory Comput. 2020, 16, 988), con motivazione: per il distinto contributo nella definizione e validazione di un nuovo protocollo computazionale generale per la caratterizzazione spettroscopica accurata di complessi molecolari di natura non covalente;

e al

Dott. Francesco Di Maiolo

per il contributo "*Dynamical Disorder and Resonance Energy Transfer: a Novel Quantum-Classical Approach*" (Phys. Chem. Chem. Phys. 2020, 22, 1061), con motivazione: per il distinto contributo allo sviluppo di un metodo teorico volto allo studio dei fenomeni di trasferimento risonante di energia quale strumento di caratterizzazione della dinamica di stati fotoeccitati in presenza di disordine dinamico.

Il Premio consiste nella somma di € 700 e nell'invito a tenere una conferenza al primo congresso organizzato dalla Divisione dopo la scadenza del bando.

Il Consiglio Direttivo della DCTC