

Data: 08/05/2026 [14:55:10 CEST]
Da: r.paciotti@unich.it
A: protocollo.farmacia@unich.it
Oggetto: relazione annuale RTD-A

Salve,
in allegato la relazione annuale relativa al lavoro svolto dal sottoscritto nel ruolo di ricercatore di tipo A (RTD-A) da sottoporre alla valutazione del Consiglio di Dipartimento nella seduta del mese di maggio.

Rimango a disposizione in caso fosse necessario fornire la versione cartacea dell'allegato in oggetto o altre informazioni.

Grazie per la disponibilità.

Buon weekend,
Roberto Paciotti

Roberto Paciotti, PhD
Dipartimento di Farmacia
Università "G. d'Annunzio" Chieti-Pescara
Via dei Vestini 31 - 66100 Chieti, Italy
Phone: +39 08713554611

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI CHIETI - PESCARA		
Dipartimento di FARMACIA		Registrazione
Anno 2026	Titolo II	Classe 08 Fascicolo
* 1560		25/05/2026
UOR	CC	RPA
FARMACIA		SEMPRE

Roberto Paciotti, PhD
Ricercatore a tempo determinato di tipo A
Dipartimento di Farmacia
Università "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara

Relazione annuale ricercatore a tempo determinato di tipo A (RTD-A) - Dipartimento di Farmacia - G.S.D.: 03/CHIM-01 - Chimica generale, inorganica e analitica (già S.C.: 03/B1 - Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici) - S.S.D.: CHIM/03 - Scienze Chimiche

Nel quarto anno (02/05/2025 - 01/05/2026) nel ruolo di ricercatore a tempo determinato tempo pieno di tipologia A (G.S.D. 03/CHIM-01 – già S.C. 03/B1; S.S.D. CHIM/03), il mio lavoro ha riguardato le attività di didattica e di ricerca scientifica di seguito descritte.

Attività didattica

Nel periodo 02/05/2025 - 01/05/2026 ho svolto attività didattica per un totale di 92 ore così suddivise:

- 24 ore/3 CFU, “Chimica Generale ed Inorganica” (CHIM/03), corso complementare dell’insegnamento di “Scienze Chimiche” nel primo anno del corso di studi in *Tecniche di prevenzione per l’ambiente e dei luoghi di lavoro* (TPALL);
- 48 ore/6 CFU, “Chimica Computazionale e Fondamenti di Informatica” (CHIM/03), insegnamento a scelta del quinto anno del corso di studi in *Chimica e Tecnologia Farmaceutiche* (CTF);
- 16 ore/2 CFU, “Laboratorio di Informatica” (INF/01), corso complementare dell’insegnamento di “Statistica e Informatica” nel primo anno del corso di studi in *Tecniche di prevenzione per l’ambiente e dei luoghi di lavoro* (TPALL);
- 4 ore, “Progettazione in silico di farmaci innovativi - 2”, insegnamento del corso di dottorato in *Scienze Biomolecolari e Farmaceutiche*, 39° ciclo;

Oltre alla didattica in aula ho svolto tutte le altre attività associate, come ricevimento studenti, preparazione del materiale didattico ed esami.

Attività di ricerca scientifica

La mia attività di ricerca si è concentrata sull'utilizzo di tecniche di calcolo *ab initio* per la caratterizzazione spettroscopica e strutturale di complessi metallici con target biologici e per lo studio delle interazioni ligando-recettore. Più recentemente, ho esteso i miei interessi di ricerca allo studio teorico di clatrati idrati, grafene funzionalizzato e sistemi LTTM (Low Transition Temperature Mixtures) per la cattura di gas come CO₂ e H₂. Parte dei risultati ottenuti in questi ambiti sono stati pubblicati nei seguenti articoli scientifici:

- M. Ciulla, N. Barbacane, R. Paciotti, S. Moffa, S. Pilato, A. Fontana, M. Tiecco, E. Rossi, F. Nencini, G. Ciancaleoni, P. Di Profio, G. Siani Tuning the balance between CO₂ absorption capacity and kinetics in diol-based low transition temperature mixtures: The dual role of 1, 2-hexanediol. *J. Mol. Liq.* **2025**, 437, 128649
- F. N. Molinari, S. Di Giacomo, E. Fazio, C. Corsaro, A. Savini, R. Paciotti, P. Di Profio, C. Iaria, F. Capparucci, A. Piperno, A. Fontana, G. Neri, M. Ciulla From Waste to Value: CO₂

Progetti di ricerca in corso

Attualmente, la mia attività di ricerca si sta concentrando sulle seguenti tematiche:

- i) Caratterizzazione spettroscopica e strutturale di complessi di oro(I) con glutatione mediante metodi di calcolo basati sulla *density functional theory* (DFT), in collaborazione con il gruppo di ricerca delle Prof. sse Fornarini e Crestoni dell'Università La Sapienza di Roma. *Manoscritto in preparazione.*
- ii) Caratterizzazione spettroscopica e strutturale di complessi dimerici di oro(I) con cisteina mediante metodi di calcolo basati sulla *density functional theory* (DFT), in collaborazione con il gruppo di ricerca delle Prof. sse Fornarini e Crestoni dell'Università La Sapienza di Roma. *Manoscritto in preparazione.*
- iii) Studio delle proprietà spettroscopiche e strutturali di clatrati idrati di H₂ in presenza di molecole stabilizzatrici (co-formers) mediante l'utilizzo di metodi di calcolo quantomeccanici, in collaborazione con il Prof. Di Profio del Dipartimento di Farmacia, Università "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara. *Manoscritto in preparazione.*
- iv) Caratterizzazione delle proprietà strutturali e del meccanismo catalitico dell'enzima iota-Anidrasi Carbonica (i-CA) mediante metodi di molecular docking, dinamica molecolare e calcoli quantomeccanici, in collaborazione con i Prof. Carradori (Dipartimento di Farmacia, Università "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara) e Carta (NEUROFARBA, Università di Firenze). (NEUROFARBA, Università di Firenze).
- v) Caratterizzazione termodinamica del processo di incapsulamento del triclabendazolo con β -ciclodestrina mediante metodi di molecular docking, dinamica molecolare e calcoli quantomeccanici, in collaborazione con il Prof. Carradori (Dipartimento di Farmacia, Università "G. D'Annunzio" Chieti-Pescara) e la Dr.ssa Ana Čikoš (Institut Ruđer Bošković di Zagabria, Croazia).
- vi) Caratterizzazione dell'interazione tra DNA G-quadruplex e metalli alcalini (Li⁺, Na⁺, K⁺ e Rb⁺) mediante dinamica molecolare e calcoli quantomeccanici in solvente esplicito.

Partecipazione a progetti di ricerca finanziati

- **Ruolo:** Responsabile di Unità, Università "G. d'Annunzio", Chieti-Pescara.
Descrizione: Progetto dal titolo "Carbon-High Adsorption by Bi-functionalized solid Sorbents", Acronimo CHARYBDIS (Codice P20227NJBK, CUP D53D23016970001), Bando PRIN 2022 PNRR. PI: Dr.ssa G. Neri, Università di Messina.
- **Ruolo:** membro unità di ricerca.
Descrizione: Progetto dal titolo "Parallelizzazione e Porting su GUP di Codici Scientifici" (PNRR Missione 4, "Istruzione e Ricerca" – Componente 2, "Dalla Ricerca all'impresa" – Linea di investimento 1.4, finanziato dall'Unione Europea – NextGenerationEU" – Progetto ICSC CN 00000013 Spoke 3, CUP C53C22000350006 Area Tematica 3), referente e PI: Prof. L. Storchi.
- **Ruolo:** membro unità di ricerca.
Descrizione: Progetto dal titolo HYDRAGRAPH - "Sviluppo di mezzi innovativi a base di clatrati e grafene per l'accumulo di idrogeno a basso requisito energetico, alto contenuto di energia netta e basso impatto ambientale" (Codice RSH2A_000023, CUP

F57G25000220006), finanziato dal Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica (MASE); referente e PI: Prof. P. Di Profio.

Collaborazioni scientifiche con gruppi di ricerca di altri atenei

- Collaborazione con il gruppo di ricerca delle Prof.sse Fornarini e Crestoni dell'Università La Sapienza di Roma.
- Collaborazione con il gruppo di ricerca della Dr.ssa Ana Čikoš dell'Institut Ruđer Bošković di Zagabria, Croazia.

Partecipazioni a congressi

1) Congresso: VITALITY - UNIURB Day 2025.

Data e località: 9 settembre 2025, Urbino.

Titolo del contributo orale: "Analisi teorica e spettroscopica di complessi di Oro(I) con Cisteina e Selenocisteina".

Attività di terza missione

Partecipazione come speaker all'evento divulgativo "*ImAginé the molecule: viaggio virtuale nella struttura chimica*" durante la manifestazione "Notte dei Ricercatori 2025-ImAginé", 26 settembre 2025, Campus Universitario di Chieti (UdA).

Il sottoscritto Roberto Paciotti, nato ad Avezzano (AQ), il 21/06/1985, C.F. PCTRRT85H21A515D, residente ad Avezzano, in Via Palermo 33, dichiara che la presente relazione è resa ai sensi degli articoli 38 e 47 del D.P.R. N. 445/2000 con piena consapevolezza delle sanzioni penali previste dall'art. 76, del medesimo D.P.R., per le ipotesi di falsità e dichiarazioni mendaci eventualmente riportate.

Il sottoscritto autorizza inoltre il trattamento dei propri dati personali e la loro eventuale comunicazione a terzi ai sensi del Regolamento UE 2016/679.

Chieti, 08/05/2026

Firma

