



AL MAGNIFICO RETTORE  
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

COD. ID: 4667

Il sottoscritto chiede di essere ammesso a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica

Responsabile scientifico: Prof. Michele Ceotto

## CURRICULUM VITAE

### INFORMAZIONI PERSONALI

Cognome	Gabas
Nome	Fabio
Data Di Nascita	07/09/1988

### OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura
Post Doc	Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano

### ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Titolo	Corso di studi	Università	anno conseguimento titolo
Dottorato Di Ricerca	Chimica	Università degli Studi di Milano	2019

### LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Inglese	C1

### PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio
2013-2015	Borsa di studio progetto L.I.S.A. presso il centro di calcolo CINECA, Segrate, finanziato dalla regione Lombardia. Attività legate al supporto HPC in diversi campi di applicazione scientifica.

### ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

Implementazione di teorie semiclassiche in codici Fortran o Python interfacciabili con software open source per calcoli quantistici e per dinamica molecolare classica, come NWChem, Gromacs e Tinker. Nello specifico i codici si basano sulla teoria semiclassica Multiple Coherent SemiClassical Initial Value Representation (MCSCIVR) e sul recente sviluppo del Divide and Conquer SemiClassical Initial Value Representation (DCSCIVR) che permette l'applicazione del metodo a sistemi di grandi dimensioni. In particolare lo scopo è quello di studiare lo spettro vibrazionale di sistemi molecolari complessi, come per esempio sistemi supramolecolari o sistemi solvatati, in cui gli effetti quantistici possono svolgere un ruolo determinante.



## CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

Data	Titolo	Sede
6-10/06/2016	Different Routes for Quantum Dynamics	Losanna, Svizzera
28-31/08/2018	High Dimensional Quantum Dynamics (HDQD), Challenges and Applications	Lille, Francia

## PUBBLICAZIONI

Articoli su riviste
A. Forni, S. Pieraccini, S. Rendine, F. Gabas, and M. Sironi, "Halogen bonding interaction with pi systems: CCSD(T), MP2 and DFT calculations", <i>ChemPhysChem</i> , 13.18 (2012): 4224-4234
C. Aieta, F. Gabas, and M. Ceotto, "An Efficient Computational Approach for the Calculation of the Vibrational Density of States." <i>The Journal of Physical Chemistry A</i> 120.27 (2016): 4853-4862
F. Gabas, R. Conte, and M. Ceotto, "On-the-fly ab initio semiclassical calculation of glycine vibrational spectrum." <i>Journal of chemical theory and computation</i> 13.6 (2017): 2378-2388
F. Gabas, Giovanni Di Liberto, Riccardo Conte, and Michele Ceotto. "Protonated Glycine Supramolecular Systems: the need for quantum dynamics" <i>Chemical Science</i> , 9 7894 (2018)
Chiara Aieta, F. Gabas, and Michele Ceotto. "A Parallel Implementation of Semiclassical Transition State Theory", <i>Journal of Chemical Theory and Computation</i> , 15.4 (2019): 2142-2153
Micciarelli, M., Gabas, F., Conte, R., & Ceotto, M. (2019). An effective semiclassical approach to IR spectroscopy. <i>The Journal of chemical physics</i> , 150(18), 184113
Gabas, F., Di Liberto, G., & Ceotto, M. (2019). Vibrational investigation of nucleobases by means of divide and conquer semiclassical dynamics. <i>The Journal of chemical physics</i> , 150(22), 224107
Conte, R., Gabas, F., Botti, G., Zhuang, Y., & Ceotto, M. (2019). Semiclassical vibrational spectroscopy with Hessian databases. <i>The Journal of chemical physics</i> , 150(24), 244118
Cazzaniga, M., Micciarelli, M., Moriggi, F., Mahmoud, A., Gabas, F., & Ceotto, M. (2020). Anharmonic calculations of vibrational spectra for molecular adsorbates: A divide-and-conquer semiclassical molecular dynamics approach. <i>The Journal of Chemical Physics</i> , 152(10), 104104
Gabas, F., Conte, R., & Ceotto, M. (2020). Semiclassical Vibrational Spectroscopy of Biological Molecules using Force Fields. <i>Journal of Chemical Theory and Computation</i> , 16(6), 3476-3475

## ALTRE INFORMAZIONI

Anno	Descrizione attività
2015	Attività lavorativa nello User Support Team di "SCS, Technology Transfer of Supercomputing Solutions for Enterprises", Segrate (MI), Italia



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del DPR n. 445/2000.

Il presente curriculum, non contiene dati sensibili e dati giudiziari di cui all'art. 4, comma 1, lettere d) ed e) del D.Lgs. 30.6.2003 n. 196.

Luogo e data: \_\_\_Milano\_\_\_, \_\_\_24/07/2020\_\_\_

FIRMA Fabio Casas