

Ferrara 7 Aprile 2023

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Procedura di selezione per la chiamata a professore di I fascia da ricoprire ai sensi dell'art. 18, comma 1, della Legge n. 240/2010 per il settore concorsuale - 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE CHIM/02, (settore scientifico-disciplinare CHIM/02 - CHIMICA FISICA) presso il Dipartimento di Chimica (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 18 del 07/03/2023) - Codice concorso 5255

[Simone Meloni] CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI (NON INSERIRE INDIRIZZO PRIVATO E TELEFONO FISSO O CELLULARE)

COGNOME	MELONI
NOME	SIMONE
DATA DI NASCITA	25 AGOSTO 1970

TITOLI

TITOLO DI STUDIO

(indicare la Laurea conseguita inserendo titolo, Ateneo, data di conseguimento, ecc.)

Luglio 1997 - Laurea in Chimica, Università di Roma "La Sapienza", Roma (IT). Titolo della tesi "Calcolo delle forze di scambio nelle collisioni elettrone-molecola" supervisore Prof. F. A. Gianturco (Dicembre 1995 - Luglio 1997). 1990-1991 Servizio Militare Obbligatorio nel corpo dei Vigili del Fuoco.

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO

(inserire titolo, ente, data di conseguimento, ecc.)

Novembre 1997 - Dicembre 2000 - Studente della scuola dottorale in Scienze Chimiche, Università di Roma "La Sapienza", Roma (IT). Titolo della tesi "Struttura e processi in fase solida studiati attraverso la dinamica molecolare e la diffrazione di raggi X", Supervisore Prof. R. Caminiti. Marzo 1999-Febbraio 2000 - Studente di Dottorato visitatore del gruppo del Prof. M. Parrinello, Max-Planck-Institut Für Festkörperforschung, Stoccarda (Germania)

ATTIVITÀ DIDATTICA

INSEGNAMENTI E MODULI

(inserire periodo [gg/mm/aa inizio e fine], anno accademico, corso laurea, numero di ore frontali, eventuale CFU)

Allo stato attuale è previsto che per l'A.A. 2023-2024 insegni per un totale di 192h

Nell'A.A. 2022-2023 insegnerò per un totale di 184h

Dal 2022 - 8 crediti - 56h. "Chimica". Laurea triennale in Fisica, Università di Ferrara, Ferrara (Italy)

Dal 2022 - 8 crediti - 36h. "Chimica Computazionale: dagli atomi ai materiali, dalle molecole alla biochimicatr". Corso creato dal Prof. Meloni. Laurea triennale in Chimica, Università di Ferrara, Ferrara (Italy)

Dal 2020 - 8 crediti - 36h. "Chimica dei materiali e modellizzazione computazionale". Corso creato del Prof. Meloni, verrà trasformato in corso di tipo "C" (48h) dall'A.A. 2023-2'24. Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Università di Ferrara, Ferrara (Italy)

Dal 2019 - intero insegnamento o moduli dei corsi di "Chimica Generale e Inorganica", 8 crediti - 48 h, per i seguenti corsi di laurea triennali:

Dal 2020 - 8 crediti - 48 h. "Chimica Generale e Inorganica", Laurea triennale in Tecnologie Agrarie e Acquacultura del Delta del Po', Università di Ferrara, Ferrara (Italy)

2019-2020 8 crediti - 48 h., ~70 studenti. 2021-2022 4 crediti - 24 h, ~500 studenti. "Chimica Generale e Inorganica", Laurea Triennale in Biotecnologie, Università Ferrara, Ferrara (Italy). ~500 studenti.

2019-2020 8 crediti - 48 h., ~1800 studenti. Dal 2022 1 credito - 8h, ~600 studenti. "Chimica Generale e Inorganica", Laurea Triennale in Biotecnologie Mediche, Università di Ferrara, Ferrara (Italy).

Dal 2016 al 2019 - 4 credits - 24h "Laboratory of atomistic and microfluidic simulations", Laura Magistrale in Ingegneria delle Nanotecnologie, Università di Roma "La Sapienza", Roma (Italy).

2014-2016 - 6 crediti - 36h "Introduzione alla Bioinformatica", Scuola di Dottorato in Scienze Chimiche, Università di Roma "La Sapienza"

2014 - Supervisione (24h) di studenti per lo svolgimento del progetto per il superamento dell'esame "Advanced Computational Methods", EPFL, Lausanne (CH).

2013 - corso monografico (6h) "Studio degli eventi rari attraverso le simulazioni computazionali", "Scuola di dottorato in Fisica Università "La Sapienza" e "Roma Tre"

2012 - corso monografico (6h) "Theory and computational techniques to study rare events in atomistic and molecular simulations." Per la Scuola Dottorale in Fisica e Chimica, University College Dublin (IE). Corso tenuto in inglese.

2007-2009 - corso monografico (6h plus lab) "Molecular Simulations" EC Master Erasmus Mundus Atosim (partnership among ENS Lyon, FR, "La Sapienza" Rome and Universiteit van Amsterdam and Vrije Universiteit Amsterdam, NL). Corso tenuto in inglese

2007-2009 - corso monografico (8h più laboratorio) "Simulazione di Eventi Rari" Scuola di dottorato in Fisica Università "La Sapienza" e "Roma Tre"

2006-2009, 2011 - 24h "Parallel Programming for Scientific Applications" "CASPUR Summers School of Advanced Computing"

ATTIVITÀ DI DIDATTICA INTEGRATIVA E DI SERVIZIO AGLI STUDENTI

ATTIVITÀ DI RELATORE DI ELABORATI DI LAUREA, DI TESI DI LAUREA MAGISTRALE, DI TESI DI DOTTORATO E DI TESI DI SPECIALIZZAZIONE

(inserire numero, anno accademico, ateneo, corso laurea, ecc.)

From 2023 - S. Buzzoni (Laurea triennale in Chimica), M. Alvelli (Laurea triennale in Chimica) Università di Ferrara;

From 2022 - F. Talpo (Laurea Magistrale in Scienze Chimiche), D. Ballardini (Laurea triennale in Chimica), A. Piantavigna (Laurea triennale in Chimica), N. Circosta (Laurea triennale in Chimica), R. Bhatia (Studente di Dottorato in Scienze Chimiche), N. Verziaggi (Laurea Magistrale in Scienze Chimiche) Università di Ferrara;

2021- S. Merchiori (Studente di Dottorato in Scienze Chimiche) Università di Ferrara; Daniele Ceneda (Laurea Magistrale in ingegneria delle Nanotecnologie), Meysam Shahrooz (Laurea Magistrale in ingegneria delle Nanotecnologie), Università di Roma "La Sapienza";

2019-2023 - M. Tortora (Studente di Dottorato in Meccanica Teorica e Applicata e Laurea Magistrale in ingegneria delle Nanotecnologie) Università di Roma "La Sapienza";

2015-2019 - S. Marchio (Studente di Dottorato in Meccanica Teorica e Applicata) Università di Roma "La Sapienza";

2013-2016 - M. Amabili (Studente di Dottorato in Meccanica Teorica e Applicata e Laurea Magistrale in Fisica) Università di Roma "La Sapienza";

2012 - M. Pourali (Studente di Dottorato in Fisica visitatore) Università di Roma “La Sapienza”;
 2012 - A. Choudhary (Laurea Magistrale in Chimica visitatore, tesi svolta sotto la mia supervisione), University College Dublin.
 2011 - 2013 - A. Giacomello (Studente di Dottorato in Meccanica Teorica e Applicata) Università di Roma “La Sapienza”;
 2011 - Dominika Lesniki (Studente Baccelloriale in Chimica da ENS Paris, tesi svolta sotto la mia supervisione), University College Dublin.
 2010 - P.-A. Geslin (Studente di laurea magistrale da École Nationale de Mines St-Etienne, tesi svolta sotto la mia supervisione), University College Dublin.
 2010-2013 - M. Lauricella, J. Lucid, A. M. Elena (Studenti di Dottorato in Fisica), University College Dublin.

SEMINARI

(inserire titolo del seminario, luogo, data, ecc.)

- 9 - (Invited) Seminar at the Valencia Polytechnique University (ES), 18 May 2023
- 8 - (Invited) “The peculiar physics of liquids confined within complex porous solids”, Phase transition at the nanoscale, S. Anna di Camprena, Pienza (IT) 23-26 June 2021.
- 7 - (Invited) “Phase stability and defects dynamics in halide perovskites: fundamental processes affecting the efficiency and stability of hybrid perovskites for solar cells applications”, FIM-S3 seminar series, online 21 April 2021.
- 6 - “Scientific challenge for next generation photovoltaics”, Campus Party, Digital Edition, 2020
- 5 - (Invited) “Lead-Halide Perovskites: theory and experiments to unveil a promising candidate for 3rd generation solar cells”, Daresbury Laboratory, Warrington (UK), 29 June 2019
- 4 - (Invited) “Intrusion/Extrusion of Liquids in/from Porous Lyophobic Materials Beyond the Classical Picture”, Daresbury Laboratory, Warrington (UK), 29 June 2019
- 3 - (Invited) “Simulation of chemical reactions and physical processes in condensed phase with applications to energy materials.”, Department Seminar, Dept. of Chemistry, University of Napoli Federico II, May 30 2019
- 2 - (invited) “Nanotechnology in materials and fibers”, workshop on Science and technology for the third millennium sportswear, University “Foro Italico”, Rome (IT) 11 April 2011
- 1 - “Dehydrogenation mechanism in sodium alanates”, CPMD 2008, Trieste (IT) 23-27 June 2008

ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

(per ciascuna pubblicazione indicare: nomi degli autori, titolo completo, casa editrice, data e luogo di pubblicazione, codice ISBN, ISSN, DOI o altro equivalente)

Sotto revisione

R1. “Optimization of the Wetting-Drying Characteristics of Hydrophobic Metal Organic Frameworks via Crystallite Size: The Role of Hydrogen Bonding between Intruded and Bulk Liquid”, L. J. W. Johnson, G. Paulo, L. Bartolomé, E. Amayuelas, A. Gubbiotti, D. Mirani, A. Le Donne, G. A. López, G. Grancini, P. Zajdel, **S. Meloni**,* A. Giacomello, Yaroslav Grosu, submitted to J. Colloids Interf. Sci., revised version submitted

R2. “Highly efficient and stable perovskite solar cells via a multifunctional hole transporting material”, J. Zhou, L. Tan, Y. Liu, H. Li, X. Liu, M. Li, S. Wang, Y. Zhang, C. Jiang, R. Hua, W. Tress, **S. Meloni**, C. Yi, Submitted to Nature, revised version submitted

R3. “Hydrophobicity and Hydrophilicity of Molecular Scale Textured Surfaces: the Case of Zeolitic Imidazolate Frameworks, an Atomistic Perspective”, A. Le Donne, J. Littlefair, M. Tortora, S. Merchiori, L. Bartolomé, Y. Grosu, **S. Meloni**, Submitted to J. Chem. Phys., revised version requested

R4. “Fabrication of Superhydrophobic Metallic Porous Surfaces via CO₂ and Water Processing”, A. Anagnostopoulos, A. Nikulin, S. Knauer, O. Bondarchuk, M. E. Navarro Rivero, L. Tiejun, T. Karkantonis, E. Palomo del Barrio, M. A. Chorążewski, Y. Li, Y. Ding, **S. Meloni**, Y. Grosu, Submitted to J. of CO₂ Utilization

R5. “Negative compressibility in metastable elastocapillary systems”, D. Caprini, F. Battista, P. Zejdel, G. Di Muccio, C. Guardiani, B. Trump, A. Andreevich Yakovenko, E. Amayuelas, L. Bartolome, **S. Meloni**,* Y. Grosu, C. Massimo Casciola and A. Giacomello, Submitted to Science Advances

Pubblicate o accettate per la pubblicazione

89. “Effect of Coarse Graining in Water Models for the Study of the Kinetics and Mechanism of Clathrate Hydrates Nucleation and Growth”, M. Lauricella, **S. Meloni**,* G. Ciccotti, Submitted to J. Chem. Phys, Special Issue for 150th anniversary of nucleation theory, Acceptor for publication in J. Chem. Phys., (IF: 3.488)

88. “On the mechanism of water intrusion into flexible ZIF-8: liquid is not vapor“, E. Amayuelas, M. Tortora, L. Bartolomé, J. D. Littlefair, G. P., A. Le Donne, B. Trump, A. A. Yakovenko, M. Chorążewski, A. Giacomello, P. Zajdel, **S. Meloni**,* Y. Grosu, Accepted for publication in Nano letters (Impact factor: 12.262)

87. “Classical nucleation of vapor between hydrophobic plates”, A. Tinti, A. Giacomello, **S. Meloni***, and C. M. Casciola, J. Chem. Phys. 158, 134708 (2023); (IF: 3.488)

86 “Impact of Donor Halogenation on Reorganization Energies and Voltage Losses in Bulk-heterojunction Solar Cells”, H. Wu, Z. Ma, M. Li, H. Lu, A. Tang, E. Zhou, J. Wen, Y. Sun, W. Tress, J. Magnus Haugaard Olsen, **S. Meloni**,* Z. Bo Z. Tang, Energy Environ. Sci. 2023, 16, 1277-1290, DOI: 10.1039/D3EE00174A, (Impact factor: 39.17)

85. "Unexpected wetting of secondary channels drastically affects the wetting properties of interconnected hydrophobic nanopores" by G. Paulo, A. Gubbiotti, Y. Grosu, **S. Meloni**,* and A. Giacomello, Communication Physics. 10.5281/zenodo.6519981 (Impact factor: 6.497)

Dissemination 2 – “Research Briefing” article: “Kavitation an Flüssig-Flüssig-Grenzflächen: Strömungsmechanik”, P. Pfeiffer, C.-D. Ohl, S. Meloni, Physik in Unserer Zeit 2023, 51, 8-9, DOI: 10.1002/piuz.202370105

Dissemination 1 – “Research Briefing” article: “The formation of gas bubbles at liquid–liquid interfaces”, P. Pfeiffer, S. Meloni, Nature Physics 2022, 18, 1410-1411

84. “Heterogeneous cavitation from atomically smooth liquid–liquid interfaces”, P. Pfeiffer, M. Shahrooz, M. Tortora, C. M. Casciola, R. Holman, R. Salomir, **S. Meloni**,* Claus-Dieter Ohl, Nature Physics 2022, 18, 1431–1435, DOI: 10.1038/s41567-022-01764-z, (Impact factor: 19.864)

- Press release Unife: <https://www.unife.it/it/notizie/2023/scienza-cultura-e-ricerca/cavitazione-ridurre-masse-tumoral-studio-nature-physics>
- https://www.ansa.it/emiliaromagna/notizie/2023/01/16/tumori-studio-nuova-chance-per-ridurre-le-masse_fa734760-25f2-4d8a-bbd7-7c7a0d6a823e.html

- <https://www.telestense.it/tumori-studio-unife-nuova-chance-per-ridurre-le-masse-20230116.html>
- <https://www.ilrestodelcarlino.it/ferrara/cronaca/tumori-ricerca-da-unife-una-nuova-strada-per-ridurre-la-massa-del-cancro-b4mw5pt0>
- <https://www.insalutenews.it/in-salute/masse-tumoriali-ridotte-in-modo-non-invasivo-bolle-di-cavitazione-per-rimuovere-il-tessuto-malato/>
- Nuova ferrara (guardare pezzo nella cartella dell'articolo – richiamo in prima pagina)

83. “Photoprotection in metal halide perovskites by ionic defect formation”, N. Phung, A. Mattoni, J. A. Smith, D. Skroblin, H. Köbler, L. Choubrac, J. Breternitz, J. Li, T. Unold, S. Schorr, C. Gollwitzer, I. G. Scheblykin, E. L. Unger, M. Saliba, **S. Meloni**,* A. Abate; A. Merdasa, *Joule* 2022, 6, 2152–2174, DOI: 10.1016/j.joule.2022.06.029 (Impact factor: 46.048)

- Press release Unife: <https://www.unife.it/it/notizie/2022/scienza-cultura-e-ricerca/perovskiti-fotovoltaico>
- <https://greenreport.it/news/energia/energia-solare-con-le-perovskiti-un-meccanismo-di-auto-protezione-per-il-materiale-fotovoltaico-del-futuro/>
- <https://emiliaromagnaeconomy.it/energia-solare-perovskiti-un-meccanismo-di-auto-protezione-per-il-materiale-fotovoltaico-del-futuro/>
- <https://www.emiliaromagnanews24.it/energia-solare-perovskiti-un-meccanismo-di-auto-protezione-per-il-materiale-fotovoltaico-del-futuro-248300.html>

82. “Turning molecular spring into nano-shock absorber: the effect of macroscopic morphology and crystal size on the dynamic hysteresis of water intrusion-extrusion into/from hydrophobic nanopores”, P. Zajdel D. Madden, R. Babu, M. Tortora, D. Mirani, N. Tsyren, L. Bartolomé, E. Amayuelas, D. Fairen-Jimenez, A. R Lowe, M. Chorążewski, J. B. Leao, C. M. Brown, M. Bleuel, V. Stoudenets, C. M. Casciola, M. Echeverría, F. Bonilla, G. Grancini, **S. Meloni**, Y. Grosu, accepted for publication by ACS applied materials & interfaces, DOI: 10.1021/acsami.2c04314 , IF: 9:229

81 - “Intrusion and extrusion of liquids in highly confining media: bridging fundamental research to applications”, A. Le Donne, A. Tinti, E. Amayuelas, H. Kumar Kashyap, G. Camisasca, R. C. Remsing, R. Roth, Y. Grosu, **S. Meloni**,* *Advances in Physics: X* 2022, 7, 2052353, DOI: 10.1080/23746149.2022.2052353, IF: 8:7

80 - “The Double Life of Methanol: Experimental Studies and Non-Equilibrium Molecular-Dynamics Simulation of Methanol Effects on Methane-Hydrate Nucleation”, M. Lauricella, Reza Ghaani, P. K. Nandi, **S. Meloni**,* B. Kvamme, Niall J. English, *J. Phys. Chem. C* 2022, 126, 6075–6081, DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c00329, IF: 4.126

79 - “Kinetics of Metal Halide Perovskite Conversion Reactions at the Nanoscale”, N. Arora, A. Greco, **S. Meloni**,* A. Hinderhofer, A. Mattoni, U. Rothlisberger, J. Hagenlocher, C. Caddeo, S. M. Zakeeruddin, F. Schreiber, M. Graetzel, R. H. Friend, M. I. Dar, *Communication Materials* 2022, 3, 22, DOI: 10.1038/s43246-022-00239-1, IF: to be assigned in 2023.

78 – “Subnanometer Topological Tuning of the Liquid Intrusion/Extrusion Characteristics of Hydrophobic Micropores”, Bushuev Yuriy, Grosu Yaroslav, Chorążewski Mirosław, **Simone Meloni***, *Nano Lett.* 2022, 22, 6, 2164–2169, DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c02140, IF: 11.238

77. "Wavefunction-based electrostatic-embedding QM/MM using CFOUR through MiMiC", T. Kirsch, J. M. Olsen, V. Bolnykh, **S. Meloni**, E. Ippoliti, U. Rothlisberger, M. Cascella, Michele; J. Gauss *J. Chem. Theory Comput.* 2022, 18, 13–24, DOI: 10.1021/acs.jctc.1c00878, IF: 6.006

76. “Crystal-size-induced band gap tuning in perovskite films”, A. Ummadisingu, **S. Meloni**,* A. Mattoni, W. Tress, M. Grätzel, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 21368–21376, DOI: 10.1002/anie.202106394, IF: 15.336

75. “Liquids intrusion-extrusion in-from non-wettable nanopores for technological applications”, A. Giacomello, C. M. Casciola, Y. Grosu, **S. Meloni*** *Eur. Phys. J. B* 2021, 94, 163, IF: 1.440

74 – “Giant Negative Compressibility by Liquid Intrusion into Superhydrophobic Flexible Nanoporous Frameworks”, Marco Tortora, Paweł Zajdel, Alexander Rowland Lowe, Mirosław Chorażewski, Juscelino B. Leão, Grethe V. Jensen, Markus Bleuel, Alberto Giacomello, Carlo Massimo Casciola, Simone **Meloni**,* and Yaroslav Grosu, *Nano Lett.* 2021, 21, 2838-2853, DOI: 10.1021/acs.nanolett.0c04941 IF: 11.238

73 – “On the accuracy of molecular simulation-based predictions of koff values: a Metadynamics study”, Riccardo Capelli, Wenping Lyu, Viacheslav Bolnykh, **Simone Meloni**, Jógvan Magnus H Olsen, Ursula Rothlisberger, Michele Parrinello, Paolo Carloni, *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11, 6373 (2020), DOI: 10.1021/acs.jpcllett.0c00999, IF: 6.71

72 – “Defect Dynamics in MAPbI₃ Polycrystalline Films: The Trapping Effect of Grain Boundaries”, Alessandro Mattoni, **Simone Meloni**,* *Helvetica Chimica Acta* 103, e2000110 (2020), DOI: 10.1002/hlca.202000110, IF: 2.309

71 – “The interplay among gas, liquid and solid interactions determines the stability of surface nanobubbles”, Marco Tortora, **Simone Meloni**,* Beng Hau Tan, Alberto Giacomello, Claus-Dieter Ohl, Carlo Massimo Casciola, *Nanoscale* 12, 22698 (2020), DOI: 10.1039/d0nr05859a (2020), IF: 6.895.

70 – “Hierarchical macro-nanoporous metals for leakage-free high-thermal conductivity shape-stabilized phase change materials”, Y. Grosu, Y. Zhao, A. Giacomello, **S. Meloni**, J.-L. Dauvergne, A. Nikulin, E. Palomo, Y. Ding, A. Faik, *Applied Energy*, 269, 115088 (2020), DOI: 10.1016/j.apenergy.2020.115088, IF: 9.27

69 – **Opinion article**: “MiMiC: Multiscale Modeling in Computational Chemistry”, V. Bolnykh, J. M. H. Olsen, **S. Meloni**, M. P. Bircher, E. Ippoliti, P. Carloni, and U. Rothlisberger, *Frontiers in Molecular Biosciences*, 7, 45 (2020), DOI: 10.3389/fmolb.2020.00045, IF: 3.565

68 – “Molecular Basis of CLC Antiporter Inhibition by Fluoride”, Chiariello M.G., Bolnykh V., Ippoliti E., **Meloni S.**, Olsen J.M.H., Beck T., Rothlisberger U., Fahlke C., Carloni P., *Journal of the American Chemical Society*, 142, 7254-7258 (2020). DOI: 10.1021/jacs.9b13588, IF: 14.695.

67 – “The Role of Grain Boundaries on Ionic Defect Migration in Metal Halide Perovskites”, N. Phung, A. Al-Ashouri, **S. Meloni**, A. Mattoni, S. Albrecht, E. L. Unger, A. Merdasa, A. Abate, *Advanced Energy Materials* 1903735 (2020), DOI: doi.org/10.1002/aenm.201903735, IF: 24.884

66 – “Atomistic origins of the limited phase stability of Cs-rich FACsPbI mixtures”, A. Boziki, D. J. Kubicki, A. Mishra, **S. Meloni**, L. Emsley, M. Grätzel, and U. Rothlisberger, *Chemistry of Materials* 32, 2605-2614 (2020), DOI: 10.1021/acs.chemmater.0c00120, IF: 10.159

65 - “Wetting and recovery of nano-patterned surfaces beyond the classical picture”, S. Marchio, **S. Meloni**,* A. Giacomello, C. M. Casciola, *Nanoscale* 11, 21458-21470 (2019), IF: 6.970

64 – “Extreme Scalability of DFT-Based QM/MM MD Simulations Using MiMiC.” Bolnykh V., Olsen J.M.H., **Meloni S.**, Bircher M.P., Ippoliti E., Carloni P., Rothlisberger U., *Journal of*

Chemical Theory and Computation 15, 5601-5613 (2019), DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00424, IF: 5.399

- Authors contribution reported in the article

63 - “Halide Versus Nonhalide Salts: The Effects of Guanidinium Salts on the Structural, Morphological, and Photovoltaic Performances of Perovskite Solar Cells”, M. Hayal Alotaibi, Y. A. Alzahrani, N. Arora, A. Alyamani, A. Albadri, Hamad Albrithen, I. H. Al-Lehyani, S. M. Alenzi, A. Z. Alanzi, F. S. Alghamdi, S. M. Zakeeruddin, **S. Meloni**,* M. I. Dar, and M. Graetzel, Solar RRS 1900234 (2019), DOI: 10.1002/solr.201900234. IF: 8.582

62 – “MiMiC: A Novel Framework for Multiscale Modeling in Computational Chemistry”, J. M. H. Olsen, V. Bolnykh, **S. Meloni**, E. Ippoliti, M. P. Bircher, P. Carloni, and U. Rothlisberger, J. Chem. Theory Comput. 15, 3810 (2019); DOI:10.1021/acs.jctc.9b00093, IF: 5.399

- Authors contribution reported in the article

61 – “Dual Effect of Humidity on Cesium Lead Bromide: Enhancement and Degradation of Perovskite Films”, D. Di Girolamo, M. I. Dar, D. Dini, L. Gontrani, R. Caminiti, A. Mattoni, M. Grätzel and **S. Meloni**,* Journal of Materials Chemistry A 7, 12292-12302 (2019), IF: 9.931

- Press release Sapienza <https://www.uniroma1.it/it/notizia/pannelli-solari-perovskite-come-migliorarne-lefficienza> 7 May 2019
- Interview on the national radio broadcast Radio24, 30 May 2019: <http://www.radio24.ilsole24ore.com/programma/smart-city/trasmissione-maggio-2019-210431-ACUiRkK>

60 – “How far does the defect tolerance of lead-halide perovskites range? The example of Bi impurities introducing efficient recombination centers.”, M. Yavari, F. Ebadi, **S. Meloni**, Z. S. Wang, T. Chien-Jen Yang, S. Sun, H. Schwartz, Z. Wang, B. Niesen, J. Durantini, P. Rieder, K. Tvingstedt, T. Buonassisi, W. C. H. Choy, A. Filippetti, T. Dittrich, S. Olthof, J.-P. Correa-Baena and W. Tress, Journal of Materials Chemistry A 7, 23838-23853 (2019), DOI: 10.1039/C9TA01744E, IF: 9.931

- Press release Sapienza <https://www.uniroma1.it/it/notizia/pannelli-solari-perovskite-come-migliorarne-lefficienza>
- Interview on the national radio broadcast Radio24, 30 May 2019: <http://www.radio24.ilsole24ore.com/programma/smart-city/trasmissione-maggio-2019-210431-ACUiRkK>
- Authors contribution reported in the article

59 – “What determines spontaneous liquid extrusion from nanopores?”, M. Amabili, Y. Grosu, A. Giacomello, **S. Meloni***, A. Zaki, F. Bonilla, A. Faik, C.M. Casciola, ACS Nano 13, 1728–1738 (2019), IF: 13.942

58 - “Hydrophilicity and Water Contact Angle on Methylammonium Lead Iodide”, C. Caddeo, D. Marongiu, **S. Meloni**, A. Filippetti, F. Quochi, M. Saba and A. Mattoni, Advanced Materials Interfaces 6, 1801173 (2019), IF: 4.834

57 – “Viscosity at the nanoscale: confined non-wetting liquid dynamics and thermal effects for self-recovering nano-bumpers”, Grosu Y., Giacomello A., **Meloni S.**, González-Fernández L.,

Chorazewski M., Geppert-Rybczynska M., Faik A., Nedelec J.-M., Grolier J.-P., J. Phys. Chem. C 122, 14248-14256 (2018), IF: 4.536

56 – “Pressure control in interfacial systems: atomistic simulations of vapor nucleation”, Marchio S., **Meloni S.***, Giacomello A., Valeriani C., Casciola C. M., J. Chem. Phys., 148, 064706 (2018), IF: 2.965

55 – “Self-Recovery Superhydrophobic Surfaces: Modular Design”, Lisi E., Amabili M., **Meloni S.***, Giacomello A., and Casciola C. M., ACS Nano 12, 359 (2018), IF: 13.942

- Press release “Sapienza” 22 February 2018, <https://www.uniroma1.it/it/notizia/dai-vetri-autopulenti-alle-eco-imbarcazioni-basso-atrito-ecco-come-i-nuovi-materiali>;
- News reported by national press agencies, Ask A News: i) http://www.askanews.it/scienza-e-innovazione/2018/02/22/ricerca-team-sapienza-progetta-nuovo-materiale-superidrofobico-pn_20180222_00154/, ii) Galileo: <https://www.galileonet.it/2018/03/materiale-superidrofobico/>, iii) LinkedIn: <https://www.linkedin.com/pulse/arrivo-nuovi-materiali-nanostrutturati-super-umberto-pivatello>;
- Interview on the national radio broadcast Radio24, 26 March 2018: <http://www.radio24.ilsole24ore.com/programma/smart-city/effetto-loto-sanno-come-155552-gSLAYnz6cC>

54 – “Activated Wetting of Nanostructured Surfaces: Reaction Coordinates, Finite Size Effects, and Simulation Pitfalls”, M. Amabili, **S. Meloni**, A. Giacomello, and C.M. Casciola, J. Phys. Chem. B 122, 200 (2018), IF: 3.177

53 - “Intrusion and extrusion of a liquid on nanostructured surfaces”, Amabili M., Giacomello A., **Meloni S.***, Casciola C. M., J. Phys.: Condens. Matter 29, 014003 (2017), IF: 2.678

- Selected for the “Highlights 2017” of the Journal of Physics: Condensed Matter: <http://iopscience.iop.org/journal/0953-8984/page/Highlights-2017>

52 – “Collective Molecular Mechanisms in the CH₃NH₃PbI₃ Dissolution by Liquid Water”, Caddeo C., Saba M. I., **Meloni S.**, Filippetti A., and Mattoni A., ACS Nano 11, 9183 (2017), IF: 13.942

51 – “Collapse of superhydrophobicity on nanopillared surfaces” Amabili M., Giacomello A., **Meloni S.**, Casciola C.M., Phys. Rev. Fluids 2, 034202 (2017), IF: 2.021

50 – “Mechanisms and Nucleation Rate of Methane-Hydrate by Dynamical Nonequilibrium Molecular Dynamics.”, Lauricella M., Ciccotti G., English N. J., Peters B., **Meloni S.**, J. Phys. Chem. C 121, 24223 (2017), IF: 4.536

49 – “Computational Characterization of the Dependence of Halide Perovskite Effective Masses on Chemical Composition and Structure.” Ashari-Astani N., **Meloni S.**, Salavati A. H., Palermo G., M Grätzel M., and Rothlisberger U., J. Phys. Chem. C 121, 23886 (2017), IF: 4.536

48 - “Focus Article: Theoretical aspect of vapour nucleation at structured surfaces”, **Meloni S.***, Giacomello A., Casciola C. M., J. Chem. Phys. 145, 211802 (2016) special issue “Nucleation: New Concepts and Discoveries”, Kenneth Kelton e Daan Frenkel Eds., IF: 2.965

47 - “Extended intermolecular Interactions Governing Photocurrent-Voltage Relations in Ternary Organic Solar Cells”, Tress W., Beyer B., Ashari Astani N., Gao F., **Meloni S.**, Rothlisberger S., J. Phys. Chem. Lett. 7, 3936 (2016), IF: 9.353

46 - “Origin of unusual bandgap shift and dual emission in organic-inorganic lead halide perovskites”, Dar M. I., Jacopin G., **S. Meloni**, Mattoni A., Arora N., Boziki A., Zakeeruddin S. M., Röthlisberger U., Graetzel M., Science Advances 2, e1601156 (2016), IF: 11.511,

- Authors contribution reported in the article
- Press release “Sapienza” 21 December 2016, <https://www.uniroma1.it/it/node/26174>
- ESI “Highly Cited Paper” of the Web of Knowledge: “top one percent in each of the 22 ESI subject areas per year”

45 - “Ionic polarization-induced current-voltage hysteresis in CH₃NH₃PbX₃ perovskite solar cells”, **S. Meloni**, T. Moehl, W. Tress, M. Franckevičius, M. Saliba, Y.H. Lee, P. Gao, M. K. Nazeeruddin, S. M. Zakeeruddin, U Rothlisberger, M. Graetzel, Nature Communications 7, 10334 (2016), IF: 12.124,

- Authors contribution reported in the article
- Press release EPFL 17 Febbraio 2016: <https://actu.epfl.ch/news/solving-hysteresis-in-perovskite-solar-cells/>
- ESI “Highly Cited Paper” of the Web of Knowledge: “top one percent in each of the 22 ESI subject areas per year”

44 - “Entropic Stabilization of Mixed A-Cation ABX₃ Metal Halide Perovskites for High Performance Perovskite Solar Cells”, Yi C., Luo J., **Meloni S.**, Boziki A., Ashari-Astani N., Grätzel C, Zakeeruddin S. M., Röthlisberger U., and Grätzel M., Energy and Environmental Science 9, 656 (2016), IF: 29.518

- Mentioned in Science In Depth <http://science.sciencemag.org/content/351/6269/113.full>
- ESI “Highly Cited Paper” of the Web of Knowledge: “top one percent in each of the 22 ESI subject areas per year”

43 - “Valence and conduction band tuning in halide perovskites for solar cells applications”, **Meloni S.**, Palermo G., Ashari Astani N., Grätzel M., Roethlisberger U., J. Mat. Chem. A 4, 15997 (2016), IF: 8.867

42 - “Clathrate structure-type recognition: application to hydrate nucleation and crystallisation”, Lauricella M., **Meloni S.**, Liang S., English N. J., Kusalik P. G., Ciccotti G., J. Chem. Phys. 142, 244503 (2015), IF: 2.894

41 - “Free Energies for Rare Events: Temperature Accelerated MD and MC”, **Meloni S.** and Ciccotti G., The European Physical Journal Special Topics, 10.1140/epjst/e2015-02418-7 (2015), IF: 1.862

40 - “Unravelling the Salvinia paradox: design principles for submerged superhydrophobicity”, M. Amabili, A. Giacomello, **S. Meloni**, and C.M. Casciola, Advanced Materials Interfaces 2, 1500248 (2015), selected for the cover and Materials Views, IF: 4.834

- Backcover of the issue
- Appeared in Materials Views,

- 39 – “Mechanism of the Cassie-Wenzel transition via the atomistic and continuum string methods” Giacomello A., **Meloni S.***, Mueller M., Casciola C. M., J. Chem. Phys. 142, 104701 (2015), IF: 2.894
- 38 – “Nucleation of silicon nanoparticles in amorphous silicon dioxide matrices”, **Meloni S.***, AIP Conf. Proc. 1624, 95 (2014)
- 37 – “Relaxation of a steep density gradient in a simple fluid: comparison between atomistic and continuum modeling.” M. Pourali, **S. Meloni***, F. Magaletti, A. Maghari, C.M. Casciola and G. Ciccotti, J. Chem. Phys., 141, 154107 (2014), IF: 2.952
- 36 - “Methane Clathrate Hydrate Nucleation Mechanism by Advanced Molecular Simulations”, Lauricella M., **Meloni S.***, English N. J., Peters B., Ciccotti G., J. Phys. Chem. C, 118, 22847 (2014), IF: 4.772
- 35 – “Massively parallel molecular dynamics simulation of formation of clathrate-hydrate precursors at planar water-methane interfaces: insights into heterogeneous nucleation”, English N., Lauricella M., **Meloni S.**, J. Chem. Phys. 140, 204714 (2014), IF: 2.952
- 34 – “Equilibrium and Rate Constants, and Reaction Mechanism of the HF Dissociation in the HF(H₂O)₇ Cluster by ab Initio Rare Event Simulations”, Elena A., **Meloni S.***, and Ciccotti G., J. Phys. Chem. A, 117, 13039 (2013), IF: 2.775

- 33 – “Geometry as a catalyst: how vapor cavities nucleate from defects” Giacomello A., Chinappi M., **Meloni S.***, Casciola C. M., Langmuir 29, 14873 (2013), IF: 4.384
- 32 - “An observable for vacancy characterization and diffusion in crystal”, Geslin P.-A., Ciccotti G., and **Meloni S.***, J. Chem. Phys. 138, 144103 (2013), IF: 3.122
- 31 - “Probing the Structures of Hydrated Nafion in Different Morphologies Using Temperature-Accelerated Molecular Dynamics Simulations”, Lucid J., **Meloni S.***, McKernan D., Spohr E., Ciccotti G., J. Phys. Chem. C, 117, 774 (2013), IF: 4.835
- 30 – Editorial, Hansen J.-P., **Meloni S.**, Vuilleumier R., Molecular Physics 111, 3335 (2013)
- 29 - "Metastable wetting on superhydrophobic surfaces: continuum and atomistic views of the Cassie–Baxter/Wenzel transition", Giacomello A., Chinappi M., **Meloni S.**, Casciola C. M., Phys. Rev. Lett., 109, 226102 (2012), IF: 7.943
- 28 - “Early Stage of the Dehydrogenation of NaAlH₄ by Ab Initio Rare Event Simulations”, Sterpone F., Bonella S., **Meloni S.***, J. Phys. Chem. C, 116,19636 (2012), IF: 4.814
- 27 - “Cassie-Baxter and Wenzel States on a Nanostructured Surface: Phase Diagram, Metastabilities, and Transition Mechanism by Atomistic Free Energy Calculations”, Giacomello A., **Meloni S.***, Chinappi M., Casciola C. M., Langmuir, 28, 10764 (2012), IF: 4.187
- 26 - “The influence of silicon nanoclusters on the optical properties of a-SiN_x samples: A theoretical study”, Guerra R., Ippolito M., **Meloni S.**, Ossicini S., Appl. Phys. Lett., 100, 181905 (2012), IF: 3.794
- 25 - "Theory and methods for rare events", Bonella S., **Meloni S.***, G. Ciccotti, Eur. Phys. J. B, 85, 97 (2012) – invited review article, IF: 1.282
- 24 - "Combining rare events techniques: phase change in Si nanoparticles.", Orlandini S., **Meloni S.***, Ciccotti G., J. Stat. Phys. 145, 812 (2011), IF: 1.397
- 23 - "Hydrodynamics from statistical mechanics: combined dynamical-NEMD and conditional sampling to relax an interface between two immiscible liquids.", Orlandini S., **Meloni S.***, Ciccotti G., Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 13177 (2011), IF: 3.573
- 22 - "Order-disorder phase change in embedded Si nanoparticles", Orlandini S., **Meloni S.***, Colombo L., Phys. Rev. B 83, 235303 (2011), IF: 3.691
- 21 - "Hydrodynamics from dynamical non-equilibrium MD", Orlandini S., **Meloni S.***, and Ciccotti G., AIP Conference Proceedings 1332, 77-95 (2011)
- 20 - "Atomistic structure of amorphous silicon nitride from classical molecular dynamics simulations.", Ippolito M. and **Meloni S.***, Phys. Rev. B 83 165209 (2011), IF: 3.691
- 19 - "Temperature Accelerated Monte Carlo (TAMC): a method for sampling the free energy surface of non-analytical collective variables.", Ciccotti G. and **Meloni S.***, Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 5952 - 5959 (2011), IF: 3.573
- 18 – “Mechanisms of self-diffusion in stoichiometric and substoichiometric amorphous silicon dioxide”, Orlandini S., **Meloni S.***, Ippolito M., Colombo L., Phys. Rev. B 81, 014203 (2010), IF: 3.774

- 17 – “Modified single sweep method for reconstructing free-energy landscapes”, Monteferrante M., Bonella S., **Meloni S.**, Ciccotti G., Molecular Simulation 35, 1116 (2009), IF: 1.502
- 16 – “Calculations of free energy barriers for local mechanisms of hydrogen diffusion in alanates”, Monteferrante M., Bonella S., **Meloni S.**, Vanden-Eijnden E., Ciccotti G., Sci. Model. Simul. 15, 187-206 (2008), IF: 0.883
- 15 – “Interface structure and defects of silicon nanocrystals embedded into a-SiO₂”, Ippolito M., **Meloni S.***, Colombo L., Appl. Phys. Lett., 93, 153109 (2008), IF: 3.726
- 14 – “Structural and electronic properties of metal doped organic semiconductors”, Zazza C., **Meloni S.**, Palma A., Mod. Phys. Lett. B 22, 1609-1631 (2008) – invited review article, IF: 0.471
- 13 – “Dissociative vs. Molecular Adsorption of Phenol on Si(100)2x1: A First Principle Calculation”, Carbone M., **Meloni S.**, Caminiti R., Phys. Rev. B, 76, 085332 (2007), IF: 3.172
- 12 – “Efficient particle labeling in atomistic simulations”, **Meloni S***, Rosati M., Colombo L., J. Chem. Phys., 126, 121102 (2007), IF: 3.044
- 11 – “Quasi-One-Dimensional K-O Chain in PTCDA Thin Films: Evidence from First-Principles Calculations”, Zazza C., **Meloni S.**, Palma A., Knupfer M., Fuentes GG, Car R, Phys. Rev. Lett. 98, 046401 (2007), IF: 6.944
- 10 – “Ab Initio Simulation of Carbon Clustering on an Ni(111) Surface: A Model of the Poisoning of Nickel-Based Catalysts”, Kalibaeva G, Vuilleumier R, **Meloni S***, Alavi A, Ciccotti G, Rosei R, J. Phys. Chem. B, 110, 3638-3646 (2006), IF: 4.115
- 9 – “Molecular and Solid State (8-hydroxy-quinoline) aluminum Interaction with Magnesium: a First Principles Study”, **Meloni S.**, Palma A, Kahn A, Schwartz J, Car R, J. Appl. Phys., 98, 023707 (2005), IF: 2.498
- 8 – “Computational Materials Science application programming interface (CMSapi): a tool for developing applications for atomistic simulations”, **Meloni S.***, Rosati M., Federico A., Ferraro L., Mattoni A., Colombo L., Comp. Phys. Comm., 169, 462-466 (2005); IF: 1.644
- 7 – “Boron ripening in amorphous silicon by large scale molecular dynamics simulations”, Mattoni A, Colombo L, **Meloni S.**, Federico A, Rosati M, Comp. Mater. Sci. 30, 43-149 (2004), IF: 1.424
- 6 – “Chemistry between magnesium and multiple molecules in tris(8-hydroxyquinoline) aluminum films”, **Meloni S.**, Palma A, Schwartz J, Kahn A, Car R, J. Am Chem. Soc., 125, 7808-7809 (2003), IF: 6.516
- 5 – “Energy-dispersive X-ray diffraction on thin films and its application to superconducting samples”, Albertini VR, Paci B, **Meloni S.**, Caminiti R, Bencivenni L, J. Appl. Crystallogr., 36, 43-47 (2003), IF: 2.324
- 4 – “SO₂Cl₂, SOCl₂: energy dispersive X-ray diffraction, ab initio and molecular dynamics calculation”, **Meloni S.**, Pieretti A., Bencivenni L., Albertini V.R., Sadun C., Caminiti R., Comput. Mater. Sci., 20, 407-415 (2001), IF: 0.67
- 3 – “A novel implicit Newton-Raphson geometry optimization method for density functional theory calculations”, Filippone F, **Meloni S.**, Parrinello M, J. Chem. Phys., 115, 636-642 (2001), IF: 3.147

2 – “The monoclinic I2 structure of bassanite, calcium sulphate hemihydrate ($\text{CaSO}_4 - 0.5\text{H}_2\text{O}$)”, Ballirano P, Maras A, **Meloni S**, Caminiti R, Eur. J. Mineral., 13, 985-993 (2001), IF: 1.577

1 - “Low-energy electron scattering from the water molecule: Angular distributions and rotational excitation”, Gianturco FA, **Meloni S**, Paoletti P, Lucchese RR, Sanna N, J. Chem. Phys. 108, 4002-4012 (1998), IF: 3.147

Book chapters

1 - “Calculations of free energy barriers for local mechanisms of hydrogen diffusion in alanates”, Monteferrante M, Bonella S, **Meloni S**, Vanden Eijnden E, Ciccotti G in Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 2009, Volume 68, 187-206

ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI CENTRI O GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

(per ciascuna voce inserire anno, ruolo, gruppo di ricerca, ecc.)

2021-2024 - Col (leader dell'unità italiana): “Electro-Intrusion - Simultaneous transformation of ambient heat and undesired vibrations into electricity via nanotriboelectrification during non-wetting liquid intrusion-extrusion into-from nanopores”, call H2020-FETPROACT-2020-2. Grant No. 101017858. Budget totale € 3651381.25 per 48 mesi; budget della mia unità € 558000 per 30 mesi.

2011-2013 - PI: “SimDepro: Deprotonation of organic molecules in solution by ab-initio MD and rare events simulation techniques”. EC-FP7 Marie Curie IntraEuropean Fellowship project, grant no. 255406. Budget ~ € 180000 in 18 mesi.

2022 - Supervisore di Bernadeta Maria Jasiok per il progetto “MEDUSA - thermodynamic anomalies in liquids using computer simulations” finanziato tra i progetti PRELUDIUM della Fondazione Scientifica Polacca (Narodowe Centrum Nauki). Budget 209938 PLN (~45000€) in 3 anni.

2017 - PI del progetto “Sapienza”: “Porous Lyophobic Crystalline Materials for Mechanical Energy Storage”, n. RG11715C81D4F43C. Budget ~ € 39000 for 1 year (finanziamento assegnato su base competitiva con *peer review*).

2015 - Col (con Prof. U. Roethlisberger) del progetto R'Equip finanziato dalla Swiss Science National Foundation, CHF 135000, con un finanziamento di eguale quantità da EPFL.

2010 - 2013 - Partner (PI Prof. G. Ciccotti) del progetto “SIMBEDD - Advanced Computational Methods for Biophysics, Drug Design and Energy Research.” Finanziato dall'Istituto Italiano di Tecnologia, grant no. 259. Budget ~800000€ in 4 anni.

2009 -2013 - Col (PI Prof. G. Ciccotti) del progetto PI-GRANT “Advanced Molecular Simulations” finanziato dalla Science Foundation Ireland, grant 08-IN.1-I1869. Budget ~850000€.

2013-2014 - Partecipazione al National Center for Competence in Research MUST - Molecular Ultrafast Science and Technology, finanziato dalla Swiss National Science Foundation. NCCR sono dei progetti che stabiliscono dei gruppi nazionali di ricerca impegnati su un certo tema scientifico

2014-2015 - Partecipazione al National Center for Competence in Research MARVEL - Computational Design and Discovery of Novel Materials, finanziato dalla Swiss National Science Foundation. NCCR sono dei progetti che stabiliscono dei gruppi nazionali di ricerca impegnati su un certo tema scientifico

ATTIVITÀ QUALI LA DIREZIONE O LA PARTECIPAZIONE A COMITATI EDITORIALI DI RIVISTE SCIENTIFICHE

(per ciascuna voce inserire anno, ruolo, rivista scientifica, ecc.)

2014 - Editore della sezione “Molecular Modeling” della “Encyclopedia of Nanotechnology”, Springer.

2012-2013 - Guest Editor of Molecular Physics, numero speciale in onore del 70mo compleanno di Giovanni Ciccotti.

PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER ATTIVITÀ DI RICERCA

(inserire premio, data, ente organizzatore, ecc.)

2023 - Vincitore di un premio monetario (da investire in attività di ricerca) del progetto H2020 European Innovation Council 112CO2 “OPPORTUNITIES FOR INTEGRATING METHANE DECOMPOSITION WITH OTHER PROCESSES” (<https://www.112co2.eu/open-calls/monetary-prize/>) col progetto intitolato “PROCEED - UPSTREAM INTEGRATION OF 112CO2 WITH GREEN METHANE PRODUCTION”.

2012 - Premio “Ireland’s Champions of EU research”, attribuito dal presidente della Repubblica Irlandese.

Articolo “Intrusion and extrusion of a liquid on nanostructured surfaces”, Amabili M., Giacomello A., Meloni S.*, Casciola C. M., J. Phys.: Condens. Matter 29, 014003 (2017), selezionato per gli “Highlights 2017” della rivista the Journal of Physics: Condensed Matter: <http://iopscience.iop.org/journal/0953-8984/page/Highlights-2017>

ESI “Highly Cited Papers”, riconoscimento assegnato agli articoli che ottengono un numero di citazioni tra l’1% più alto rispetto agli articoli dello stesso campo ed anno di pubblicazione:

- “Ionic polarization-induced current-voltage hysteresis in CH₃NH₃PbX₃ perovskite solar cells”, Nat. Commun. 7, 10334 (2016).
- “Entropic Stabilization of Mixed A-Cation ABX₃ Metal Halide Perovskites for High Performance Perovskite Solar Cells”, EES 9, 656 (2016),
- “Origin of unusual bandgap shift and dual emission in organic-inorganic lead halide perovskites”, Dar M. I., Jacopin G., S. Meloni*, Mattoni A., Arora N., Boziki A., Zakeeruddin S. M., R  thlisberger U., Graetzel M., Science Adv. 2, e1601156 (2016)

Abilitazione scientifica nazionale di prima fascia in:

- 02/B2 FISICA TEORICA DELLA MATERIA
- 03/B1 FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI
- 03/B2 FONDAMENTI CHIMICI DELLE TECNOLOGIE
- 03/A2 MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE

Abilitazione scientifica nazionale di seconda fascia in:

- 02/B2 FISICA TEORICA DELLA MATERIA
- 03/B1 FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI
- 03/B2 FONDAMENTI CHIMICI DELLE TECNOLOGIE
- 03/A2 MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE

dal 2023 - Membro internazionale del panel di Scienze Fisiche e Matematiche del Rede Nacional de Computa  o Avan  ada (Portugal) per l’assegnazione dei grant nazionali di calcolo portoghesi.

dal 2021 - Membro internazionale di diversi panel della Polish Science Foundation per l’attribuzione di finanziamenti per la ricerca (secondo gli accordi sottoscritti, i dettagli non possono essere dichiarati in quest sede).

dal 2021 - Membro della sezione “Materiali” del comitato di esperti di EuroHPC - Joint High Performance Computing undertaking. EuroHPC    un’iniziativa congiunta promossa dalla comunit   europea fondata nel 2021 che coinvolge molti stati dell’unione, compresa l’Italia. L’obiettivo    quello

di coordinare e condividere le risorse europee nell'ambito del computing. Tra le altre cose, EuroHPC rimpiazzera la precedente attività PRACE.

dal 2020 - Reviewer dei progetti computazionali PRACE.

dal 2019 - Reviewer della fondazione francese per il finanziamento della ricerca ANR.

2015 - Copertina posteriore di Advances Materials Interfaces, "Superhydrophobicity: Unraveling the Salvinia Paradox: Design Principles for Submerged Superhydrophobicity", Advanced Materials Interfaces 2, 1500248 (2015)

2014 - Editore della sezione "Molecular Modeling" della "Encyclopedia of Nanotechnology", Springer.

2012-2013 - Guest Editor of Molecular Physics, numero speciale in onore del 70mo compleanno di Giovanni Ciccotti.

2012 - Premio "Ireland's Champions of EU research", attribuito dal presidente della Repubblica Irlandese.

2012 - Review Article su invito: "Theory and methods for rare events", Eur. Phys. J. B, 85, 97 (2012)

PARTECIPAZIONE IN QUALITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI DI INTERESSE INTERNAZIONALE

(inserire titolo congresso/convegno, data, ecc.)

63 - (Invited) siMol meeting, Oxfordshire (UK), 31 October-1 November 2023

62 - (Invited) Conference on Artificial Photosynthesis and Green Catalysis, Lausanne (CH), July 17-19 2023

60 - (Invited) "Intrusion of water in hydrophobic crystalline porous materials", Metastability and multiscale effects in interfacial phenomena, Lausanne (CH), 13-15 March 2023

59 - (Invited) "Getting liquids in and out porous materials: a theoretical point of view", Symposium on Materials for Emerging Energy Technologies, Madrid (ES), 19-20 May 2022

58 - (Invited) "Ab initio simulation to improve the resistance to inactivation and enhance recovery of nickel-based catalysts for methane dehydrogenation.", International Hydrogen Summer School, Porto (PT), 5-8 September 2022.

57 - (invited) "Mobile ionic species in halide perovskites: Thermodynamics, dynamics, energetics and unexpected consequences on the properties of the material from atomistic simulation", SimOEP'22, International Conference on Simulation of Organic Electronics and Photovoltaics, Winthertun (CH), 7-9 September 2022

56 - "Wetting and drying of nanoporous systems: From theoretical modeling to design principles of novel energy materials", ACS Fall meeting 2022, Chicago (USA), 21-25 August 2022.

55 - (Invited) Teaching to the School "Multiscale Molecular Dynamics with MiMiC", Lausanne (CH), July 18-22, 2022

53 - "What does Determines the Stability of Surface Nanobubbles?", Transnational Access Meeting (TAM) of HPC Europa 3, 3-4 November 2021, online

50 - "Interaction between Ionic Defects and Grain Boundaries in Metal Halide Perovskites", Atomic-level Characterization of Hybrid Perovskites (HPATOM), online 26-28 January 2021

49 - (Invited) "Liquid intrusion (and extrusion) in porous and textured materials", Frontiers in ion channels and nanopores-theory, experiments, and simulation, online 2-5 February 2021

48 - (Invited) "From first principles to the simulations of complex systems", series of 4 lectures, "Multiscale simulations and biological channels", Rome (IT) 14-16 September 2020

46 - (Invited) "Spatial and temporal multiscale simulations of nanofluidic systems: from physics and chemistry to engineering", CECAM 50° - Italian celebration day, Bologna (IT) 9/7/2019

45 - "Dynamical Effects in Confined Nucleation", Roma Tre Congress on Water under Extreme Conditions, Rome (IT), 12-14 June 2019

- 42 - "Intrusion/Extrusion of Liquids in/from Porous Lyophobic Materials Beyond the Classical Picture", Mainz Materials Simulation Days 2019, Mainz (GE), 5-7 June 2019
- 40 - (Invited) "Wetting of lyophobic textured surfaces and porous materials", "Colloquium", Trento University, 13 November 2018
- 39 - (Invited) "Liquid intrusion/extrusion in porous systems: atomistic and continuum rare event simulations with engineering applications", Computer Simulation in the Physical & Life Sciences, Temple University in Roma (IT), 26 October 2018
- 38 - "Bubble Nucleation in Water Under Extreme Confinement: Modular Design of Hydrophobic Textured Surfaces to Enhance Self-Recovery of the Cassie-Baxter State", WaterX exotic properties of water under extreme conditions, Maddalena Island (IT), 3-8 June 2018
- 37 - (Invited) "Homogeneous and Confined Nucleation of Vapor Bubbles", ISR International Workshop Series II - The Fluid Dynamics of Bubbles across the Scales, Guangzhou (CN) 28-30 September 2017
- 36 - (Invited) "Rare Events: Theory and Methods", ISR International Workshop Series II - The Fluid Dynamics of Bubbles across the Scales, Guangzhou (CN) 28-30 September 2017
- 35 - (Invited) "Nucleation mechanism of the sequential deposition process", €-MRS, Warsaw (PL) 17-22 September 2017
- 34 - (Invited) "Mechanisms and Nucleation Rate of Methane-Hydrate by Dynamical Nonequilibrium Molecular Dynamics.", Addressing metastability in interfacial phenomena across multiple time and length scales, Lausanne (CH), 29 August-1 September 1, 2017
- 33 - "Vapor nucleation under extreme confinement", XXIX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2017), Paris (FR) 9-13 July 2017
- 32 - (Invited) "Unusual photoluminescence emissions in lead halide perovskites and their molecular origin", 21 International Conference on Solid State Ionics, Padua (IT), 18-23 June 2017
- 31 - "Vapor nucleation under extreme confinement", Congress on Water Under Extreme Conditions, 2017, Rome (IT), 14-16 June 2017
- 30 - (Invited) "Ab initio hydrodynamics", 19h International Conference on Finite Elements in Flow Problems - FEF 2017, Rome (IT), 5-7 April 2017
- 29 - (Invited) "The Salvinia Paradox: how the hydrophilic patches help keeping the plants surface dry", Workshop "Hybrid Methods in Molecular Simulation", Cagliari (IT), 3-4 April 2017
- 28 - "The Salvinia Paradox: how the hydrophilic patches help keeping the plants surface dry", CECAM/ESI Workshop "Water at interfaces: from proteins to devices", Wien (AT), 29 November - 2 December 2016
- 27 - (Invited) "Superhydrophobicity recovery on complex surfaces", Nanoinnovation 2016, Rome (IT), 20-23 September 2016
- 26 - "Dewetting of superhydrophobic surface", mMAST, Brussels (BE), 6rd-8th September 2016
- 24 - "The Salvinia Paradox: how hydrophilic patches help keeping its surface dry", Italian Soft Days, Milan (IT), 23rd-24th June 2016
- 23 - "Mechanism of the Cassie-Wenzel transition via the atomistic and continuum string methods", 2nd Conference on Multiscale Modelling of Condensed Phase and Biological Systems, Manchester (UK), 13th -15th April 2016
- 22 - "Hysteresis in perovskite solar cells: experimental and theoretical evidence of its defect-related origin ", Roma (IT), HOPV15, 10th-13th May 2015
- 21 - (Invited) "Wetting of textured surfaces by advanced atomistic and continuum simulations", "Superhydrophobicity, bubble stability, and heterogeneous nucleation", Rome (IT), Joint CECAM Workshop and Sapienza Conference, Rome (IT), 25th-27th June 2014
- 20 - (Invited) "Methane clathrate hydrate nucleation mechanism by advanced sampling techniques", CECAM Workshop "Molecular-level understanding of nucleation", Lausanne (CH), 23rd-25th June 2014
- 19 - (Invited) "Multiscale simulations to study structural and electronic properties of Si nanoparticles embedded in a-SiO₂ and a-SiN_x dielectrics.", Conference "SiO₂, Advanced Dielectrics and Related Devices", Cagliari (IT), 16-18 June 2014

- 18 - (Invited) "Rare event methods: modern techniques and their application to challenging chemical and physical problems", Physical and Theoretical Chemistry Colloquia, 23 April 2014, Univ. of Duisburg-Essen
- 17 - (Invited) "Superhydrophobicity lost: the Cassie-Baxter to Wenzel phase transition", "Advanced Molecular Simulation Methods in the Physical Sciences", Beijing (CH), 24th-30th July 2013
- 16 - (Invited) "Time-dependent Non-equilibrium Molecular Dynamics", "Lorentz center international workshop "Modelling the Dynamics of Complex Molecular Systems", Leiden (NL) 13th-24th August 2012
- 15 - (Invited) "A pseudo-quantum description of vacancy diffusion in crystals", CECAM Workshop "Free energy calculations: from theory to applications", "Modeling the dynamics of complex molecular systems" Conference, Leiden (NL) 13-24 August 2012
- 14 - (Invited) "A pseudo-quantum description of vacancy diffusion in crystals", CECAM Workshop "Free energy calculations: from theory to applications", Paris 4-8 June 2012
- 13 - "A novel approach to study vacancy dynamics in crystals (by rare event techniques)", SimBioMa Conference, Konstanz (DE) 28 September - 1 October
- 11 - (Invited) "Data Management in Europe", ZCAM-CECAM workshop on Databases in Quantum Chemistry, Zaragoza (ES) 21-24 September 2010
- 10 - "Study of nucleation by rare event methods", LAM 14, Rome (IT) 11-16 July 2011
- 9 - (Invited): "Hydrodynamics from non-equilibrium statistical mechanics: evolution of a curved interface between immiscible liquids", SIMAI 2010, Cagliari (IT) 21-25 June 2010
- 7 - "Dehydrogenation mechanism in sodium alanates", SimBioMa Conference, Konstanz (DE) 5-8 April 2008
- 6 - "Ab-initio simulation of carbon clustering on Ni(111) surface: the bonding mechanism between Na and C.", Conference on Computational Physics 2007, Brussels (BE) 5-8 September 2007
- 5 - "ESF Forward Look for non-hardware aspects of Computational Science Infrastructure", Conference on Computational Physics 2007, Brussels (BE) 5-8 September 2007
- 4 - "Hydrogen Diffusion in Sodium Alanates", Conference on Computational Physics 2007, Brussels (IT) 5-8 September 2007
- 3 - "Computational Material Science Application Programming Interface (CMSApi): a tool for developing applications for atomistic simulations", INTERNATIONAL SCHOOL OF SOLID STATE PHYSICS - 34th course: Computer Simulations in Condensed Matter: from Materials to Chemical Biology.
- 2 - "Ab-initio study of carbon clustering on Ni(111) surface", Conference on Computational Physics 2004, Genoa (IT) 1-4 September 2004
- 1 - "Reduction on arrays: comparison of performances between different algorithms", Fifth European Workshop on OpenMP (EWOMP), 22-23 September 2003, Aachen (GE)

ORGANIZZAZIONE DI CONGRESSI E CONVEGNI DI INTERESSE INTERNAZIONALE

(inserire titolo congresso/convegno, data, ecc.)

- 2023 - "Fluids in Porous Materials: from Fundamental Physics to Engineering Applications", Lausanne (CH), 19-21 June 2023
- 2022 - €MRS Fall Meeting Symposium "Breakthrough zero-emissions energy storage and conversion technologies for carbon-neutrality", 19-22 September 2022, Varsavia (PL)
- 2022 - Scuola CECAM su "Multiscale Modeling with MiMiC, Lausanna, 18-22 July 2022, Lausanne (CH)
- 2018 - "NanoGe Fall Meeting", simposio "Halide perovskites: when theory meets experiment from fundamentals to devices", Berlin (GE), 4-8 November 2019
- 2017 - "Addressing metastability in interfacial phenomena across multiple time and length scales", Lausanna (CH), 28 Agosto - 1 September 2017

2014 - "Binding free energy and kinetics: computation meets experiments", Genova (IT), 10-12 June 2014

2014 - "Superhydrophobicity, bubble stability, and heterogeneous nucleation", Rome (IT), 25-27 June 2014

2013 - "Five pieces and a do in computational physics, chemistry, biology, mathematics and engineering", Roma (IT), 18-20 December 2013

2013 - "Simulations and experiments on Materials for Hydrogen Storage", Dublino (IE), 11-13 October 2010

2008 - "standardization and databasing of classical and ab-initio atomistic simulations", ETH, Zurigo (CH), 18-19 September 2008

2008 - Scuola "Progress in simulating activated processes", Valle Capore (Roma, IT), 26-30 May 2008

COORDINAMENTO DELL'ATTIVITÀ DI COLLABORATORI DI LIVELLO POSTDOTTORALE O SUPERIORE

(inserire numero, anno accademico, ateneo, corso laurea, ecc.)

DAL 2021 - J. D. Littlefair (Assegnista di ricerca), A. Le Donne (Assegnista di ricerca), Università di Ferrara;

2018-2019 - E. Lisi (Assegnista di ricerca), A. Battisti (Assegnista di ricerca), University of Rome "La Sapienza";

2013-2016 - M. Amabili (Assegnista di ricerca), University of Rome "La Sapienza";

2007-2013 - M. Ippolito (postdoc e dipendente a tempo indeterminato), CASPUR Supercomputing Centre;

2006-2009 - F. Sterpone (postdoc), CASPUR Supercomputing Centre;

2004-2011 - L. Ferraro (dipendente a tempo indeterminato), CASPUR Supercomputing Centre;

2003-2004 - C. Zazza (postdoc), CASPUR Supercomputing Centre;

FINANZIAMENTI PER LA RICERCA

(inserire numero, anno accademico, ateneo, corso laurea, ecc.)

Finanziamenti Europei

2021 - Col (leader dell'unità italiana): "Electro-Intrusion - Simultaneous transformation of ambient heat and undesired vibrations into electricity via nanotriboelectrification during non-wetting liquid intrusion-extrusion into-from nanopores", call H2020-FETPROACT-2020-2. Grant No. 101017858. Budget totale € 3651381.25 per 48 mesi; budget della mia unità € 558000 per 30 mesi.

2020 - 3 grant H2020 HPC-Europe3 per finanziare visitatori legati ad attività di ricerca di interesse comune presso l'Università di Ferrara per un totale di 24 settimane (~ € 8500 + costi di viaggio): Alin Marin Elena, STFC (UK); Argyrios Anagnostopoulos, Brighton University (UK); Jógvan Magnus Haugaard Olsen, DTU (DK).

2011 - PI: "SimDepro: Deprotonation of organic molecules in solution by ab-initio MD and rare events simulation techniques". EC-FP7 Marie Curie IntraEuropean Fellowship project, grant no. 255406. Budget ~ € 180000 in 18 mesi.

Finanziamenti Nazionali e Locali (non solo italiani)

2022 - Supervisore di Bernadeta Maria Jasiok per il progetto "MEDUSA - thermodynamic anomalies in liquids using computer simulations" finanziato tra i progetti PRELUDIUM della Fondazione Scientifica Polacca (Narodowe Centrum Nauki). Budget 209938 PLN (~45000€) in 3 anni.

2020 - 2022 - Diversi finanziamenti dell'Università di Ferrara assegnati per progetti per i quali ho funto da PI per un totale di € 16000

2017 - PI del progetto "Sapienza": "Porous Lyophobic Crystalline Materials for Mechanical Energy Storage", n. RG11715C81D4F43C. Budget ~ € 39000 for 1 year.

2015 - Col (com Prof. U. Roethlisberger) del progetto R'Equip finanziato dalla Swiss Science National Foundation, CHF 135000, con un finanziamento di eguale quantità da EPFL.

2010 - Partner (PI Prof. G. Ciccotti) del progetto "SIMBEDD - Advanced Computational Methods for Biophysics, Drug Design and Energy Research." Finanziato dall'Istituto Italiano di Tecnologia, grant no. 259. Budget ~800000€ in 4 anni.

2009 - Col (PI Prof. G. Ciccotti) del progetto PI-GRANT "Advanced Molecular Simulations" finanziato dalla Science Foundation Ireland, grant 08-IN.1-I1869. Budget ~850000€.

Grandi Grant Computazionali assegnati su base competitiva

Grants ottenuti come PI per un totale di ~225x10⁶ corehours, corrispondenti a € 2250000 (stima conservativa basata sulla dichiarazione ufficiale di ICHEC, supercomputing centre Irlandese and e stima ufficiosa degli esperti del centro di supercomputing italiano CINECA). Nel dettaglio

2020 - two-years PRACE project "NAUTILUS - ENergy scAvening by liqUid InTrusion in Lyophobic poroUs Systems". 87x10⁶ corehours in total on Marconi100@CINECA (IT).

2019 - PRACE project "PROVING-IL: PeROVskite Interface eNgeerinG with Ionic Liquids". 41x10⁶ corehours on MarconiKNL@CINECA (IT).

2019 - CINECA ISCRA projects "PRICE-IL". 10⁷ corehours on MarconiKNL@CINECA (IT).

2018 -PRACE project "ADRENALINE - hAliDe peRovskites sEqueNtiAL deposItioN mEchanism (by ab initio rare events simulations)". 78x10⁶ corehours on PizDaint@CSCS (CH).

2010 - FP7-DEISA Extreme Computing Initiative "DePro". 2.1x10⁶ corehours.

2009-2013 - 2 progetti classe A e 5 progetti classe C dello Irish Centre for High-End Computing (ICHEC). 7x10⁶ total corehours.

Grant ottenuti come Co-PI or Col per un totale di ~146x10⁶ corehours, corrispondenti a € 1460000. In particolare:

2015 - (PI Prof. A. Giacomello) two-years PRACE project "WETMD - Unravelling the Salvinia paradox: towards a new generation of superhydrophobic surfaces". 89x10⁶ total corehours on Fermi@CINECA.

2015 - (PI Prof. U. Roethlisberger) PRACE project "PeroConduction: Electron-Hole transport in Perovskites materials by non- equilibrium electron dynamics". 17x10⁶ corehours on SuperMUC@LRZ.

2013 - (PI Prof. C. M. Casciola) PRACE project "SLIP - Salvinia-inspired surfaces in action: slip, cavitation, and drag reduction". 30 x10⁶ corehours on Fermi@CINECA.;

ESPERIENZE LAVORATIVE

da Giugno 2022 - Professore Associato, Dip. di Scienze Chimiche, Farmaceutiche e Agrarie (DOCPAS), Università di Ferrara (IT);.

Da Giugno 2019 - Visiting scientist dello Science and Technology Facilities Council presso il Daresbury Laboratory.

Giugno 2019 - Maggio 2022 Ricercatore a tempo determinato B, Dip. di Scienze Chimiche, Farmaceutiche e Agrarie (DOCPAS), Università di Ferrara (IT);

Gennaio 2016-Maggio 2019 - Ricercatore a tempo determinato A, Dip. di Ingegneria Meccanica e Aerospaziale, University di Roma "La Sapienza", Roma (IT); Leader del team "porous materials and textured surfaces" nel contesto del progetto ERC Advanced "Cavitation across scales: following Bubbles from Inception to Collapse - BIC" guidato dal Prof. Casciola.

Novembre 2013 - Dicembre 2015 - Ricercatore, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lousanne (CH); Membro del gruppo della Prof. Roethlisberger. Membro dei centri nazionali per le Competenze in Ricerca - NCCR - MARVEL and MUST.

September 2009 - October 2012 - Ricercatore (dal 1/5/2001 EC-FP7 Marie-Curie Fellow), University College Dublin, (IE); Membro del gruppo "Advanced Molecular Simulations" guidato dal Prof. Ciccotti. Leader del team "Nanomaterials for Energy and ICT applications".

Marzo 2001 - Ottobre 2013 - Dipendente a tempo indeterminato del CASPUR (fino a Luglio 2012) e CINECA Supercomputing Centres (IT). Dal 2006 al 2009 Coordinatore del programma di training "Scientific and Technical Computing". In aspettativa non retribuita dal Settembre 2009 all'Ottobre 2012 (vedere precedente esperienza lavorativa): CINECA e CASPUR NON sono istituzioni accademiche o enti di ricerca

Gennaio 2001 - Marzo 2001 - Postdoc visitatore del gruppo del Prof. R. Car, Princeton University, Princeton (NJ, USA).

ATTIVITÀ DI PUBLIC ENGAGEMENT

(inserire titolo congresso/convegno, data, ecc.)

Interviste su radio nazionali (Radio24) su materiali per l'energia

- 27 Gennaio 2021: <https://www.radio24.ilsole24ore.com/programmi/smart-city/puntata/trasmissione-27-gennaio-2021-210402-ADNEZBGB>
- 30 Maggio 2019: <http://www.radio24.ilsole24ore.com/programma/smart-city/trasmissione-maggio-2019-210431-ACUiRkK>
- 26 Marzo 2018: <http://www.radio24.ilsole24ore.com/programma/smart-city/effetto-lotto-sanno-come-155552-gSLAYnz6cC>

Articoli apparsi su quotidiani e riviste

- <https://www.ilrestodelcarlino.it/ferrara/cronaca/tumori-ricerca-da-unife-una-nuova-strada-per-ridurre-la-massa-del-cancro-b4mw5pt0>
- <https://www.ilrestodelcarlino.it/ferrara/cronaca/dagli-ammortizzatori-dell-auto-si-può-produrre-energia-pulita-1.5918569>
- "Scenari" de Il Sole 24ore, article "Da energia di scarto a elettricità a zero emissione" ("from waste energy to zero emission electric energy"), February 28 2022

Articoli online

- PRACE grant success stories" Understanding And Improving The Tolerance Of Perovskites" <https://prace-ri.eu/understanding-and-improving-the-tolerance-of-perovskites/>

Presentazioni pubbliche

- "Dalla meccanica quantistica ai materiali per l'energia pulita del futuro" per i "Venerdì dell'Universo", 2022

Visite a scuole

- "Il laboratorio in un computer: dalla meccanica quantistica alla progettazione dei materiali del futuro."

ATTIVITÀ GESTIONALI, ORGANIZZATIVE E DI SERVIZIO

INCARICHI DI GESTIONE E AD IMPEGNI ASSUNTI IN ORGANI COLLEGIALI E COMMISSIONI, PRESSO RILEVANTI ENTI PUBBLICI E PRIVATI E ORGANIZZAZIONI SCIENTIFICHE E CULTURALI, OVVERO PRESSO L'ATENEO O ALTRI ATENEI

(inserire incarico/impegno, ente, data, ecc.)

2022 - Membro della Commissione per l'ammissione al XXXVIII ciclo Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, Università di Ferrara

2022 - Membro della Commissione per il prolungamento di una posizione RTDA, Dip. Di Scienze Chimiche, Farmaceutiche e Agrarie, Università di Ferrara

2021 - 3 volte Membro della commissione per il conferimento di un assegno di ricerca, Dip. Di Scienze Chimiche, Farmaceutiche e Agrarie, Università di Ferrara

Dal 2022 - Coordinatore delle attività di Tirocinio interno del corso di laurea triennale in Chimica dell'Università di Ferrara

2022 - Membro del comitato per la redazione della proposta e, dopo l'approvazione, l'implementazione di un'infrastruttura per il calcolo ad alte prestazioni presso UNIFE, 400k€.

Dal 2022 - Membro del gruppo UNIFE che sta realizzando il progetto PNRR “Ecosistemi per la ricerca”: “ECOSISTER: Ecosistema Territoriale di Innovazione dell’Emilia-Romagna”

2022 - Corodinatore dell’attività UNIFE per la preparazione di un progetto PNRR “Partenariati Estesi” per il tema 4, “Quantum Sciences and Technologies”.

Dal 2022 - Membro del comitato per l’assegnazione dei finanziamenti del dipartimento di Scienze Chimiche Farmaceutiche e Agrarie (DOCPAS) dell’Università di Ferrara.

Dal 2022 - Coordinatore dei tutorati trasversali di Chimica di Base per le lauree triennali in i) Biologia, ii) Biotecnologie, iii) Tecnologie Agrarie e di Acquacultura del Delta dell’Università di Ferrara.

Dal 2021 - Leader del team dell’Università di Ferrara partecipante al progetto H2020 Future and Emerging Technologies project: “Electro-Intrusion - Simultaneous transformation of ambient heat and undesired vibrations into electricity via nanotriboelectrification during non-wetting liquid intrusion-extrusion into-from nanopores”.

Dal 2021 - Coordinatore delle attività di Comunicazione, Disseminazione e Sfruttamento del progetto H2020 Future and Emerging Technologies project: “Electro-Intrusion - Simultaneous transformation of ambient heat and undesired vibrations into electricity via nanotriboelectrification during non-wetting liquid intrusion-extrusion into-from nanopores”.

Dal 2021 - Rappresentante del progetto Electro-Intrusion nel comitato per la collaborazione tra progetti vincitori della call H2020-FETPROACT-2020-2.

2020-2022 - Responsabile per la supervisione e il supporto per l’utilizzo delle infrastrutture per la didattica a distanza del dipartimento di Scienze Chimiche Farmaceutiche e Agrarie (DOCPAS) durante la crisi COVID-19,

From 2020 - Membro della Commissione “Ricerca e Terza Missione” del dipartimento di Scienze Chimiche Farmaceutiche e Agrarie (DOCPAS)

From 2020 - Membro del Consiglio dei Docenti della Scuola Dottorale in Scienze Chimiche dell’Università di Ferrara.

2011-2020 - Membro del Consiglio dei Docenti della Scuola Dottorale in Meccanica Teorica e Applicata dell’Università di Roma “Sapienza”.

2006-2009 - Coordinatore del programma dei corsi di “Scientific and Technical Computing” del centro CASPUR supercomputing centre

2006-2009 - Segretario Scientifico del “Forward Look Initiative” della European Science Foundation: “EUROPEAN COMPUTATIONAL SCIENCE: THE “LINCEI INITIATIVE”: FROM COMPUTERS TO SCIENTIFIC EXCELLENCE”

Data

7 Aprile 2023

Luogo

Ferrara