

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, (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

**MICHELE CEOTTO
CURRICULUM VITAE**

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	CEOTTO
NOME	MICHELE
DATA DI NASCITA	02/03/1972
WEBSITE	https://sites.unimi.it/ceotto/
ORCID / SCOPUS ID	0000-0002-8270-3409 / 6506511203

POSIZIONE ACCADEMICA

ATTUALE

Dal 01/10/2015 Professore Associato (CHIM/02) presso il Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano (UNIMI) (chiamata diretta in quanto vincitore della ERC Consolidator Grant (ERC-CoG) del 2014)

PRECEDENTE

Dal 01/09/2006 al 30/09/2015 Ricercatore Universitario (CHIM/02) prima presso il Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica e poi presso il Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano (UNIMI)

TITOLI

TITOLO DI STUDIO

Laurea in Chimica (110/110 cum laude), relatore Prof. F. A. Gianturco, Università degli Studi di Roma "La Sapienza" conseguita in data 15/04/1999 con la tesi: *"Protonazione dell'ozono in fase gassosa: energetica del processo ed effetti di intersezioni coniche"*

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA

Ph.D. in Chimica, conseguito in data 20/05/2005 presso la University of California at Berkeley (USA). Titolo della tesi: *"Semiclassical and Quantum Instanton approximations for thermal rate constants of chemical reactions"*. Relatore Prof. W. H. Miller

ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE (SETTORE CONCORSUALE 03/A2)

Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore di prima fascia nel settore concorsuale 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE conseguita in data 31/07/2018 e valida fino al 31/07/2028

ALTRI TITOLI CONSEGUITI

- Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore di prima fascia nel settore concorsuale 02/B2 - FISICA TEORICA DELLA MATERIA conseguita in data 08/08/2018 e valida fino al 08/08/2028
- Laurea in Fisica (110/110), Università degli Studi di Roma "La Sapienza" conseguita il 13/07/2000. Titolo della tesi *"Effetti della fase di Berry in processi molecolari in fase gassosa"*

ATTIVITÀ DI FORMAZIONE POST-DOTTORALE

2005-2006 Postdoctoral Fellow presso il "Center for Biophysical Modeling and Simulation" nel Gruppo di ricerca del prof. G.A. Voth, Dept. of Chemistry, University of Utah, Salt Lake City (USA)

ATTIVITÀ DIDATTICA

ATTIVITÀ DI DOCENZA (Didattica Frontale)

- Docente (CHIM/02) responsabile e presidente della commissione d'esame del Corso di "Metodi chimico-fisici di indagine applicati a sistemi molecolari e nanostrutturati", corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche e corso di laurea triennale in Chimica, UNIMI. 3 CFU e 24 ore erogate negli anni accademici 2011/12, 2012/13, 2013/14, 2014/2015, 2015/16, 2016/17, 2018/19, 2019/20, 2020/21, 2021/22, 2022/23.
- Docente (CHIM/02) del modulo di Laboratorio ed esaminatore del Corso di "Chimica Fisica A", fondamentale di indirizzo per la laurea magistrale in Chimica, UNIMI. 3 CFU e 48 ore erogate per gli anni accademici 2016/17, 2017/18, 2018/19, 2019/20, 2020/21, 2021/22, 2022/23.
- Docente (CHIM/02) responsabile e presidente della commissione d'esame del Corso "Chimica Quantistica", corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche e corso di laurea triennale in Chimica, UNIMI. 3 CFU e 24 ore erogate negli anni accademici 2015/16, 2016/17, 2017/18, 2018/19, 2019/20, 2020/21, 2021/22, 2022/23.
- Docente (CHIM/02) responsabile e presidente della commissione d'esame del Corso "Chimica Teorica", corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche, UNIMI. 3 CFU, 24 ore erogate per gli anni accademici 2007/08, 2008/09, 2009/10, 2011/12, 2012/13, 2013/14, 2014/15, 2015/16, 2016/17, 2017/18, 2018/19, 2019/20, 2020/21, 2021/22, 2022/23.
- Docente (CHIM/02) ed esaminatore per il corso di "Chimica Fisica" per il corso di laurea triennale in Chimica Applicata e Ambientale, UNIMI. 3 CFU e 24 ore erogate per gli anni accademici 2010/11 e 2011/12.

La seguente tabella ricapitola i dati precedenti fornendo un riassunto per anno accademico al fine di mettere in luce il volume, l'intensità e la continuità delle attività svolte. Tutti i moduli erogati per l'a.a. 2022/23 sono stati conclusi entro il 04/04/2023, come da registro elettronico.

Anno Accademico	n° di corsi	Ore totali	CFU totali
2007/08	1	24	3
2008/09	1	24	3
2009/10	1	24	3
2010/11	1	24	3
2011/12	3	72	9
2012/13	2	48	6
2013/14	2	48	6
2014/15	2	48	6
2015/16	3	72	9
2016/17	4	120	12
2017/18	3	96	9
2018/19	4	120	12
2019/20	4	120	12
2020/21	4	120	12
2021/22	4	120	12
2022/23	4	120	12

Come si evince dai dati riportati, per i corsi di indirizzo chimico fisico (CHIM/02) ho effettuato, considerando i moduli erogati all'interno di uno stesso anno accademico, didattica frontale per un totale di 19 multipli di 48 ore. A questi si aggiungono ulteriori 12 moduli di 24 ore erogati in anni accademici diversi.

La decisione di suddividere tra due docenti il carico didattico di alcuni corsi (tra cui "Chimica Quantistica", "Chimica Teorica" e "Metodi chimico-fisici di indagine applicati a sistemi molecolari e nanostrutturati"), anche se afferenti per intero al SSD CHIM/02 e all'ambito teorico, è stata presa dal Collegio Didattico nell'ambito delle strategie volte a valorizzare le varie competenze specifiche all'interno di corsi specialistici, e non è quindi dovuta in alcun

modo ad aspetti legati a competenze didattiche, valutazioni degli studenti, o altre considerazioni di natura didattica e/o scientifica.

ATTIVITÀ DI CO-DOCENZA PRESSO UNIMI

- Co-docente (CHIM/02) per il corso di Laboratorio di Chimica Fisica I, corso di laurea triennale in Chimica, UNIMI, per gli anni accademici 2006/07, 2007/08, 2008/09, 2009/10, 2010/11, 2011/12, 2012/13, 2013/14, 2014/15, 2015/16. 48 ore per anno accademico, 3 CFU per un totale di 480 ore.

ATTIVITÀ DI CO-DOCENZA PRESSO UNIVERSITÀ STRANIERE

Nelle seguenti attività ho effettuato didattica frontale senza la presenza dell'altro docente in classe.

- Co-docente (Teaching Assistant) del corso "Laboratory of Chemical Physics" per il Bachelor in Chemistry per il semestre autunnale dell'anno accademico 2003/04 e 2004/05 presso la University of California at Berkeley (USA) per un totale di 120 ore.
- Co-docente (Teaching Assistant) del corso "Biophysical Chemistry: Principles of Thermodynamics" per il Bachelor in Biology and Chemistry per il semestre autunnale dell'anno accademico 2002/03 presso la University of California at Berkeley (USA) per un totale di 60 ore.
- Co-docente (Teaching Assistant) del corso "Quantum Mechanics: Principles of Quantum Mechanics" per il Master in Physical Chemistry per il semestre autunnale dell'anno accademico 2001/02 presso la University of California at Berkeley (USA) per un totale di 60 ore.
- Co-docente (Teaching Assistant) del corso "Principles of Chemistry" per il Bachelor in Chemistry per il semestre autunnale dell'anno accademico 2000/01 presso la University of California at Berkeley (USA) per un totale di 60 ore.

ATTIVITÀ DI DOCENZA PRESSO LA SCUOLA DI DOTTORATO IN CHIMICA E DI DOTTORATO IN CHIMICA INDUSTRIALE (UNIMI)

- Docente co-responsabile (CHIM/02) ed esaminatore per il corso "Chemistry at Surfaces: Experiments and Theory" per l'**anno accademico 2010/2011**; docente ospite prof. G.-J. Kroes, Leiden University. **2 ore**
- Docente co-responsabile (CHIM/02) per il corso "Taking a glance on ultrasmall and ultrafast worlds: time-resolved and free-electron laser probes for chemical applications" per l'**anno accademico 2012/2013**; docente ospite Prof. J. Davisson, Uppsala University. **2 ore**
- Docente responsabile (CHIM/02) per il corso "Physical Chemistry of Nanosized Titania: first principles calculations versus experiments" per l'**anno accademico 2014/2015**; docente ospite Prof. N. Serpone, Concordia University e Università degli Studi di Pavia. **4 ore**
- Docente responsabile (CHIM/02) per il corso "Frontiers in theoretical spectroscopy of biological systems" per l'**anno accademico 2021/2022**; docente ospite Prof.ssa B. Mennucci, Università di Pisa. **2 ore**
- Incaricato come docente responsabile (CHIM/02) per il corso "Infra-red Spectroscopy of Complex Molecular Systems" da tenersi a maggio 2023. Attività prevista 2 ore.

ATTIVITÀ DI DIDATTICA INTEGRATIVA E DI SERVIZIO **AGLI STUDENTI**

ATTIVITÀ DI TUTORATO AGLI STUDENTI COME RELATORE DI TESI DI DOTTORATO

1. Relatore di tesi di dottorato in Chimica (CHIM/02) dello studente Davide Moscato dal 2021. Argomento della tesi: *"Quantum Vibrational Spectroscopy of Nucleic Acids in the Physiological Environment"*.
2. Relatore di tesi di dottorato in Chimica (CHIM/02) dello studente Michele Gandolfi dal 2020. Argomento della tesi: *"Sviluppo di algoritmi per la dinamica classica e semiclassica"*.
3. Relatore di tesi di dottorato in Chimica (CHIM/02) dello studente Giacomo Mandelli dal 2020. Argomento della tesi: *"Inclusion of Quantum Mechanical Effects in Kinetic Rate Constant Calculations and Spectroscopy via Semiclassical Dynamics"*.
4. Cotutela della tesi di dottorato in Chimica (CHIM/02) della studentessa Erika Fallacara presso la Sorbonne Université dal 2019 al 2022. Argomento della tesi: *"Modeling isotope effects in condensed matter and molecular systems"*.
5. Relatore della tesi di dottorato in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Alessandro Rognoni dal 2018 al 2021. Argomento della tesi: *"Advances in semiclassical dynamics with applications to the vibrational spectroscopy of complex systems"*.
6. Relatore della tesi di dottorato in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Fabio Gabas dal 2015 al 2018. Argomento della tesi: *"Implementation of Semiclassical Theories for Spectroscopy"*.
7. Relatore della tesi di dottorato in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Giovanni Di Liberto dal 2015 al 2018. Argomento della tesi: *"New Semiclassical theories for vibrational spectroscopy"*.
8. Relatore di tesi di dottorato in Scienze Chimiche (CHIM/02) della studentessa Chiara D. Aieta dal 2014 al 2017. Argomento della tesi: *"Quantum and Semiclassical Methods for Rate Constants Calculations"*.

ATTIVITÀ DI TUTORATO AGLI STUDENTI COME RELATORE DI TESI DI LAUREA MAGISTRALE

1. Relatore di tesi di laurea magistrale in Industrial Chemistry dello studente Paolo Cattaneo nell'a.a. 2022/23. Argomento della tesi: *"artificially decoupled molecular dynamics"*.
2. Relatore di tesi di laurea magistrale in Industrial Chemistry dello studente Ivan Rozkov Ivanov nell'a.a. 2020/21. Argomento della tesi: *"Study of tunneling correction approaches for theoretical kinetic modelling"*.
3. Relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Giacomo Mandelli nell'anno accademico 2019/20. Argomento della tesi: *"Parallel and efficient implementation of anharmonic constant calculations for semiclassical reaction rates"*.
4. Relatore di tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Giacomo Botti nell'a.a. 2018/19. Argomento tesi: *"Dipendenza delle frequenze di vibrazione dal livello di teoria elettronica: costruzione e studio semiclassico su una serie di superfici analitiche per lo stato elettronico fondamentale della formaldeide"*.
5. Relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) della studentessa Erika Fallacara nell'a.a. 2017/18. Argomento della tesi: *"Nuclear Quantum Effects in crystalline potassium hydroxide"*.
6. Relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Alessandro Rognoni nell'a.a. 2017/18. Argomento della tesi: *"Autofunzioni semiclassiche: costruzione e applicazioni"*.
7. Relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Lorenzo Parma nell'a.a. 2017/18. Argomento della tesi: *"Dinamica semiclassica ad alta efficienza per calcoli spettroscopici"*.
8. Relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Francesco Moriggi nell'a.a. 2017/18. Argomento della tesi: *"Studio sperimentale e computazionale dell'adsorbimento di ossidi di azoto su TiO₂"*.

9. Relatore della tesi di laurea magistrale in Chimica (CHIM/02) dello studente Roberto Bellani nell'a.a. 2015/16. Argomento della tesi: *"Studio delle interazioni superficiali tra le molecole (3-amminopropil)trietossisilano, (3-amminopropil)dietossisilanol, (3-amminopropil)etossisilandiolo e superfici di TiO₂ Anatasio (101)"*
10. Relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Giovanni Di Liberto nell'a.a. 2014/2015. Argomento della tesi: *"Studio da principi primi di TiO₂ dopato per la fotocatalisi e metodi teorici per la dinamica semiclassica"*
11. Relatore tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) della studentessa Chiara D. Aieta nell'a.a. 2012/14. Argomento della tesi: *"Parallelizzazione del Calcolo Semiclassico delle Costanti di Reazione in Presenza di Tunnelling"*.
12. Relatore tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Matteo Azzola nell'a.a. 2011/12. Argomento della tesi: *"Structural and Electronic Calculations of Doped Titania Nanostructures"*.

ATTIVITÀ DI TUTORATO AGLI STUDENTI COME RELATORE DI ELABORATI DI LAUREA (TRIENNALE)

1. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Leonardo Raso nell'a.a. 2021/22. Argomento della tesi: *"Study of vibrational density of states applied to the calculation of temperature for isolated molecules"*
2. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Paolo Cattaneo nell'a.a. 2020/21. Argomento della tesi: *"Metodi di integrazione del moto per la Dinamica Molecolare Classica basati sulle matrici Hessiane"*
3. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Alessandro Fasan nell'a.a. 2017/18. Argomento della tesi: *"Buca di potenziale infinita: trattazione classica, quantistica e semiclassica"*
4. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Giacomo Botti nell'a.a. 2016/17. Argomento della tesi: *"Un nuovo approccio per velocizzare la stima degli Hessiani nella dinamica semiclassica"*
5. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Alessandro Rognoni nell'a.a. 2015/16. Argomento della tesi: *"Approccio semiclassico alla determinazione quantistica dell'energia cinetica nucleare"*
6. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Giacomo Buccella nell'a.a. 2015/16. Argomento della tesi: *"Studio Di Fotocatalizzatori A Base Di TiO₂: Approccio Teorico Ab-Initio e Spettroscopia EXAFS"*
7. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Lorenzo Parma nell'a.a. 2015/16. Argomento della tesi: *"Applicazioni semiclassiche per il calcolo di frequenze vibrazionali molecolari"*
8. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Francesco Moriggi nell'a.a. 2015/16. Argomento della tesi: *"Adsorbimento di NO su superfici di TiO₂: un approccio computazionale"*
9. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Davide Balestra nell'a.a. 2015/16. Argomento della tesi: *"Studio dell'adsorbimento di CO su diversi polimorfi del TiO₂: caratterizzazione con metodi ab initio"*
10. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Stefano Americo nell'a.a. 2016/17. Argomento della tesi: *"Spettri in approssimazione armonica di molecole adsorbite su titania"*
11. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica della studentessa Giovanna Bruno nell'a.a. 2014/15. Argomento della tesi: *"Effetto dell'anarmonicità della superficie di potenziale in processi di tunnelling"*
12. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Giovanni Di Liberto nell'a.a. 2012/2013. Argomento della tesi: *"Importanza dell'approccio computazionale nello studio di materiali innovativi a base di TiO₂"*
13. Relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Francesco Dambrosio nell'a.a. 2012/2013. Argomento della tesi: *"Dinamica Molecolare Semiclassica Accelerata su GPU"*
14. Relatore tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) della studentessa Chiara D. Aieta nell'a.a. 2009/10. Argomento della tesi: *"Studio Analitico e Computazionale dell'Effetto Tunnelling"*.

15. Relatore tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Davide Lotti nell'a.a. 2009/10. Argomento della tesi: "Studio di Propagatori Classici per una Dinamica Molecolare Robusta".
16. Relatore tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Matteo Azzola nell'a.a. 2009/10. Argomento della tesi: "*Studio Teorico degli Effetti del Drogaggio di Biossido di Titanio*".

ATTIVITÀ DI TUTORATO AGLI STUDENTI COME CO-RELATORE DI ELABORATI DI LAUREA, DI TESI DI LAUREA MAGISTRALE, E DI TESI DI DOTTORATO

1. Co-relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Luca Corneo nell'a.a. 2022/23.
2. Co-relatore di tesi di dottorato in Chimica della studentessa Cecilia Lanzi dall'a.a. 2022/23.
3. Co-relatore di tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Davide Moscato nell'a.a. 2020/21.
4. Co-relatore di tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) della studentessa Cecilia Lanzi dal 2021.
5. Co-relatore della tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) della studentessa Cecilia Lanzi nell'a.a. 2020/21.
6. Co-relatore di tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Davide Barbiero dal 2022.
7. Co-relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Alessandro Fasan dal 2021.
8. Co-relatore di tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Davide Barbiero nell'a.a. 2020/21.
9. Co-relatore di tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) dello studente Yassir El Moutaoukal nell'a.a. 2020/21.
10. Co-relatore di tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Giacomo Buccella nell'a.a. 2017/18.
11. Co-relatore della tesi di laurea triennale in Fisica dello studente Giorgio Ruffa nell'a.a. 2015/16.
12. Co-relatore di tesi di dottorato in Chimica dello studente Manuel Orlandi negli a.a. 2012/16.
13. Co-relatore tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente Davide Lotti nell'a.a. 2012/13.
14. Co-relatore di tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) della studentessa Silvia Toti nell'a.a. 2011/12.
15. Co-relatore della tesi di dottorato in Fisica dello studente Salvatore Mandrà nell'a.a. 2010-2013.
16. Co-relatore tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) della studentessa Stephanie Valteau nell'a.a. 2010/11.
17. Co-relatore tesi di laurea triennale in Chimica (CHIM/02) della studentessa Stephanie Valteau nell'a.a. 2007/08.
18. Co-relatore di tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche (CHIM/02) dello studente David dell'Angelo nell'a.a. 2007/08.

INTRODUZIONE E SPERIMENTAZIONE DI TECNICHE DIDATTICHE INNOVATIVE

Oltre a svolgere i compiti didattici che mi sono stati richiesti dal Consiglio di Coordinamento Didattico, da Università estere e dal Dipartimento di Chimica nelle varie forme di tutorato agli studenti, ho sempre cercato di introdurre tecniche didattiche innovative. Per esempio, per confrontare la preparazione dei laureati triennali con altre Università europee, come membro della Commissione Didattica, ho proposto e ottenuto di introdurre l'**Echem-Test** della European Chemistry Thematic Network (ECTN), società composta da oltre 120 Università europee. Il test in questione è stato composto da commissioni di docenti universitari di diverse Università europee e rappresenta un esperimento didattico finalizzato ad ottenere uno **standard di valutazione europeo condiviso**. Questo esperimento didattico è stato illustrato nella pubblicazione: **M. Ceotto***, C. Manuali, A. Manfredi,

"Massive implementation of the European Chemistry Test at University of Milan", Virtual Innovation, Research, Teaching & Learning Communities. - ISSN 2279-8773 - 4 (2013).

ATTIVITÀ DIPARTIMENTALE DI TUTORATO AGLI STUDENTI

- Attività di tutorato per gli studenti iscritti al corso di laurea triennale in Chimica e corso di laurea magistrale in Scienze chimiche. 14 studenti nell'a.a. 2013/14, 10 nell'a.a. 2014/15, 15 nell'a.a. 2015/16, e 16 nell'a.a. 2016/17. Attività prima coordinata dal prof. C. Oliva e successivamente dal prof. A. Vertova.

ATTIVITÀ DI "OPPONENT" (CONTRO-RELATORE) PRESSO UNIVERSITÀ STRANIERE

1. 20/4/2021: "Opponent" per l'esame di dottorato di T. Begusic, presso il Dipartimento di Chimica all'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svizzera).
2. 26/9/2016 "Opponent" per l'esame di dottorato di Y. Bronstein, presso l'Université Pierre et Marie Curie, Parigi (Francia).
3. 2015 "Opponent" per l'esame di dottorato di M. Wehrle, presso il Dipartimento di Chimica all'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svizzera).
4. 2010 "Opponent" per l'esame di Master in Chimica di J. Rohrbach, presso il Dipartimento di Chimica all'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svizzera).
5. 15/1/2010 "Opponent" per l'esame di Master in Chimica di M. Wehrle, presso il Dipartimento di Chimica all'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svizzera).

VALUTAZIONE DELLA DIDATTICA DA PARTE DEGLI STUDENTI

La valutazione complessiva degli studenti per i corsi tenuti da me tenuti è sempre stata soddisfacente nella parte di valutazione del docente. In particolare, per le voci riguardanti "Il docente stimola / motiva l'interesse verso la disciplina?", "Il docente espone gli argomenti in modo chiaro ed esauriente?", "Il docente è reperibile per chiarimenti e spiegazioni?", e "Il docente è corretto e disponibile nel rapporto con gli studenti?" le valutazioni sono state per la maggior parte al di sopra della media del CdS.

SEMINARI / INVITED LECTURES

1. 2022-Marzo: Scuola di Dottorato in Chimica, Università di Perugia, "*Semiclassical Molecular Dynamics for Nuclear Spectroscopy*"
2. 2019-Febbraio: Università di Pisa, Seminario di Dipartimento "*Semiclassical Molecular Dynamics and its Implementation for Spectroscopic Calculations of High Dimensional and Condensed Phase Molecular Systems*"
3. 2019-Gennaio: Center for Complexity & Biosystems (Università degli Studi di Milano, Milano), "*Quantum Mechanical Methods for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems*"
4. 2018-Ottobre: Bochum University (Germania), "*Semiclassical Methods for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems*" (invited lecturer).
5. 2017-Luglio: D.E. Shaw Research (Manhattan, New York, USA), Seminario Aziendale "*Semiclassical "Divide-and-Conquer" Method for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems*"
6. 2014-Febbraio: EPFL (Lausanne, CH), "*A General Purpose Implementations of Semiclassical Molecular Dynamics for CPU and GPU hardware*", (invited lecturer).
7. 2014-Gennaio: Max-Planck-Institut für Physik Komplexer Systeme, Seminario di Istituto (Dresden, Germania), "*Ab initio Semiclassical molecular dynamics for CPU and GPU hardware*"
8. 2010-Febbraio: EPFL (Lausanne, CH), "*Multiple Coherent States for first-principles Semiclassical Molecular Dynamics*", (invited lecturer).
9. 2004-Dicembre: Seminario presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Perugia (Italy), "*How to calculate thermal rate constants for chemical reactions*"
10. 2000-Marzo: Seminario presso il Consejo Superior de las Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid (Spain), "*Conical Intersections*"

ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA

CAPACITÀ DI ATTRARRE FINANZIAMENTI SU BANDI COMPETITIVI IN QUALITÀ DI PI O RESPONSABILE DI PROGETTO SCIENTIFICO

1. 2015-2022 ERC Consolidator Grant 2014, 1 899 973 € per il progetto SEMICOMPLEX, *"Divide and Conquer ab initio Semiclassical Molecular Dynamics for Spectroscopic Calculations of Complex Systems"*, PI (Responsabile di Progetto)
2. 2022-2024 ERC Proof of Concept Grant 2022, 150 000 € Lump Sum Grant per il progetto SEMISOFT, *"A web-platform interfaced software for spectroscopic molecular characterization and early diagnosis of Parkinson's disease"*, PI (Responsabile di Progetto).
3. 2018-2022 FARE-MIUR, 182 340 € per il progetto QURE, *"A theoretical-computational study of photocatalytic remediation of polluted atmospheres"*, PI (Responsabile di Progetto)
4. 2020-2023 BORSE DOTTORATI - BANDO NAZIONALE INPS, 46 000 € per il progetto *"Simulation for CO₂ conversion into methane"*, PI (Responsabile di Progetto)
5. 2014 Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, 6 800 €, *"Ab initio semiclassical Molecular Dynamics"*, PI (Responsabile di Progetto)

Totale fondi ottenuti come PI di progetti scientifici: 2 285 113 €

PARTECIPANTE A PROGETTI FINANZIATI A LIVELLO NAZIONALE E/O INTERNAZIONALE

1. 2011 bando competitivo emesso da NVIDIA (USA), 8 000 € in Hardware, titolo del progetto: *"GPU accelerated semiclassical molecular dynamics"*
2. 2009-2013 "Cinque per Mille", bando competitivo emesso dell'Università degli Studi di Milano su fondi provenienti da donazioni, 40 000 €, titolo del progetto: *"Monitoring and environmental remediation of organic and inorganic pollutants from waste waters: a theoretical and experimental approach"*
3. 2009-2011 Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MIUR), bando PRIN, 117 000 €, titolo del progetto: *"DFT calculations of confined nano-systems"*
4. 2007-2009 MIUR, bando PRIN, 121 000 €, titolo del Progetto: *"Quantum-mechanical calculations for gas phase molecular spectra"*

RESPONSABILE DI PROGETTO COMPUTAZIONALE FINANZIATO IN TEMPO MACCHINA DOPO PEER-REVIEW

1. 2016-2017 Laboratorio Interdisciplinare per la Simulazione Avanzata - Produzione (LISA_P), CINECA/Regione Lombardia, (1 116 668 CPU ore equivalenti a 37 200 €), per il progetto GREENTI, *"Quantum mechanical investigation of active TiO₂"*
2. 2014-2015 LISA_P, CINECA/Regione Lombardia, (1 800 000 CPU ore equivalenti a 63 000 €), per il progetto SURGREEN, *"Quantum mechanical investigation of active TiO₂-based interfaced"*
3. 2014 LISA - Sviluppo, CINECA/Regione Lombardia, (100 000 CPU ore equivalenti a 3 300 €), per il progetto SCTST, *"Parallelization of the MultiWell Program Suite for Semiclassical Thermal Rate Constant Calculations"*
4. 2013-2014 LISA_P, CINECA/Regione Lombardia, (600 000 CPU ore equivalenti a 20 000 €), per il progetto MATGREEN, *"New titania materials for environmental remediation"*

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

- “Handling and Reviewer” Editor for “Frontiers in Chemistry” dal 13/7/2012 ad oggi.
- Membro del “RSC Advances Reviewer Panel”

ATTIVITÀ DI REFERAGGIO SCIENTIFICO

Ho referato per le seguenti riviste:

Nature Communications
Nanoscale
Advanced Materials
Journal of Chemical Physics
Journal of Chemical Theory and Computation
Journal of Physical Chemistry A/B/C/Lett.
ACS Nano
Journal of Materials Chemistry
Chemical Communications
Molecular Physics
International Journal of Quantum Chemistry
Chemical Sciences
Chemical Physics Letters
Dalton Transactions
Physical Chemistry Chemical Physics
ChemPhysChem
Chemistry of Materials
Current Applied Physics,
Research of Chemical Intermediates
Journal of the Chinese Chemical Society
Inorganic Chemistry
ACS Omega
Materials Today Communications
Physics Letters A

Ho referato per i seguenti bandi di ricerca e/o istituzioni:

MIUR: “Futuro in Ricerca” (FIRB);
Referaggio per la VQR;
MIUR: FISIR2020 Covid-19;
ETH Grant Research Proposal;
Fondecyt Science Council - Conicyt (Chile),
CECAM, Institute for computing and data sciences (ISCD) at Sorbonne Université;
MIUR: “Scientific Independence of young Researchers” (SIR);
MIUR: PRIN;
Vidi 2022 (Dutch Research Council, NL);
Università dell’Insubria (Bando per l’erogazione del Fondo per ricercatori a tempo determinato - 2022);
National Science Center of Poland.

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

1. 2022-Settembre: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM), Congresso Internazionale “*Theories of Molecular Scattering and Spectra based on the Quantum-Classical Synergy*”; titolo dell’intervento: “Implementations of Semiclassical Approximations for Spectroscopic and Vibrational Eigenfunction Calculations”, (**su invito**).
2. 2022-Giugno: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM), Congresso Internazionale “*Challenges of molecular spectroscopy: Theory meets experiment*”

- (Lausanne, Switzerland); titolo dell'intervento: "Semiclassical molecular dynamics as a useful tool for nuclear spectroscopy", (**su invito**)
3. 2021-Novembre: Virtual International Seminar on Theoretical Advancements (VISTA), Seminar #26; titolo dell'intervento: "Semiclassical Initial Value Representation Molecular Dynamics for Spectroscopy" (**su invito**)
 4. 2021-Aprile: American Chemical Society (ACS) Spring Meeting 2021 (online), sezione "Dynamics of Chemical Reactions from Gas Phase to Interfaces, A Symposium in Honor of Professor William L. Hase"; titolo dell'intervento: "*Semiclassical Molecular Dynamics for Spectroscopic Calculations*" (**su invito**)
 5. 2019-Settembre. Congresso Internazionale: Vibrational Spectroscopy Conference (VISPEC) dal titolo "*Emerging trends in Vibrational Spectroscopy*", Università di Brescia (Italy). Keynote lecture dal titolo: "*Semiclassical Molecular Dynamics: a useful tool for Spectroscopic interpretation*". (**su invito**)
 6. 2019-Giugno. Congresso Internazionale: Recent developments in Quantum Dynamics, Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, CECAM-FR-RA Centre Blaise Pascal, ENS Lyon (France), 17-21 Giugno 2019; titolo dell'intervento: "*Semiclassical molecular dynamics for spectroscopic calculations of high dimensional and condensed phase molecular systems*" (**su invito**)
 7. 2019-Gennaio. Congresso Internazionale: Fifth C4 (Zurich, CH); titolo dell'intervento: "*Semiclassical Molecular Dynamics for Spectroscopic Calculations of Complex Systems*", (**su invito**)
 8. 2017-Luglio. Congresso Internazionale: Telluride (CO-USA), Quantum Effects in Condensed Phase Systems; titolo dell'intervento: "*Method for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems*", (**su invito**)
 9. 2017-Luglio. Congresso Internazionale: XIV International Workshop on Quantum Reactive Scattering, Trieste (IT); titolo dell'intervento: "*Quantum and Semiclassical methods for molecular rate constants and vibrational spectra calculations*", (**su invito**)
 10. 2017-Giugno. Congresso Internazionale: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, CECAM-FR-MOSER Discussion Meeting Practical problems with dynamical nuclear quantum effects through semiclassical methods, Parigi, 26-28 Giugno 2017. Titolo dell'intervento: "*Semiclassical 'Divide-and-Conquer' Method for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems*", (**su invito**)
 11. 2015-Dicembre: Sede CNR Roma, Congresso Nazionale della Società di Chimica Italiana, Divisione di Chimica Teorica e Computazionale; titolo dell'intervento: "*A mixed SC-IVR and Thawed Gaussian Propagator*" (**su invito**)
 12. 2014-Settembre: Società di Chimica Italiana (Università della Calabria, Arcavacata di Rende, Italy); titolo dell'intervento: "*A General Purpose Implementations of Semiclassical Molecular Dynamics for CPU and GPU hardware*"
 13. 2014-Settembre: Società di Chimica Italiana (Università della Calabria, Arcavacata di Rende, Italy); titolo dell'intervento: "*Doped nano-titania: theoretical insight into structure-property relationships*"
 14. 2014-Gennaio: Regione Lombardia LISA meeting (Milano, Italy); titolo dell'intervento: "*Progettazione di Nuovi Materiali per l'Abbattimento di Inquinanti. Come proteggere i nostri monumenti*", (**su invito**)
 15. 2014-Gennaio: INFN e Consorzio GARR "Training Workshop on Application Porting" (Roma, Italy); titolo dell'intervento: "*Introduction to Quantum Espresso for semiconductors applications*", (**su invito**)
 16. 2012-Luglio. Congresso Internazionale: NSF/PIRE Workshop (Pisa, Italy); titolo dell'intervento: "*First Principles Semiclassical Molecular Dynamics*", (**su invito**)
 17. 2013-Giugno. Congresso Internazionale: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, CECAM Workshop "Many-dimensional quantum dynamics with (non)classical trajectories" (Lausanne, Switzerland); titolo dell'intervento: "*Ab initio direct semiclassical molecular dynamics*", (**su invito**)
 18. 2013-Giugno: Società Italiana di Chimica, Divisione di Chimica Fisica (Alessandria, Italy); titolo dell'intervento: "*Doped Titania Nanocrystals explained by Experimental and DFT Characterizations*"
 19. 2010-Ottobre: The 61st Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry (Nice, France); titolo dell'intervento: "*Doped versus undoped titania nanocrystals: theoretical bottom-up approach vs. experimental flatband potential studies*"

20. 2010-Luglio: Istituto Eni Donegani, Congresso Internazionale "Transport in Complex Quantum Systems", Novara, Italy; titolo dell'intervento: "*Resonances in Complex Quantum Systems from a Semiclassical Dynamics Perspective*", (**su invito**)
21. 2008-Settembre. Congresso Internazionale: UK Collaborative Computational Project 6, (CCP6) 2008dal titolo "Multidimensional Quantum Mechanics with Trajectories School of Chemistry", University of Leeds (UK). Titolo dell'intervento: "*First-principles Semiclassical Molecular Dynamics*", (**su invito**)
22. 2008-Agosto. Congresso Internazionale: "Quantum Dynamics Concepts: From Path Integrals to Semiclassical" Workshop and Seminar, Max-Planck-Institut fur Physik Komplexer Systeme (Dresden, Germany). Titolo dell'intervento: "*Semiclassical Initial Value Representation Implementations*", (**su invito**)
23. 2001-Ottobre: "Graduate Research Conference" (GRC), Berkeley (USA); titolo dell'intervento: "*How to Mimic Tunnelling from Asymptotic Conditions*"
24. 1999-Settembre: Società Chimica Italiana, Divisione di Chimica Fisica (Firenze, Italy); titolo dell'intervento: "*Conical Intersections effects in the gas phase molecular protonation*"
25. 1999-Giugno: Società Chimica Italiana, Divisione di Chimica Fisica, incontro dal titolo "Structure, Properties, Reactivity and Dynamics", (Varenna, Italy). Titolo dell'intervento: "*Conical Intersections effects in the gas phase molecular protonation*"

Nel complesso ho quindi presentato personalmente a congresso 18 talk su invito e altri 7 talk su contributo. In aggiunta, sono stato anche co-autore di oltre 40 talk presentati a congresso da collaboratori, per un totale di circa 70 contributi a congresso/workshop.

ORGANIZZATORE DI CONGRESSI E CONVEGNI DI INTERESSE INTERNAZIONALE

1. 5—7 Settembre 2022: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire CECAM Congresso Internazionale: "*Theories of molecular processes and spectra based on the quantum-classical synergy*", Bordeaux, France; <https://www.cecarn.org/workshop-details/1044>
2. 13-17 Giugno 2022: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire CECAM Congresso Internazionale: "*Challenges of molecular spectroscopy: Theory meets experiment*", Lausanne, Switzerland; <https://www.cecarn.org/workshop-details/1034>
3. 14-23 Settembre 2021; XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana "SCI 2021", "*La Chimica guida lo sviluppo sostenibile*", Organizzatore locale per conto della "Divisione di Chimica Teorica e Computazionale"; <https://www.sci2020.org>
4. 6-10 Giugno 2016: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire CECAM Congresso Internazionale: "*Different routes to quantum molecular dynamics*", Lausanne, Switzerland; <https://www.cecarn.org/workshop-1319.html>
5. 17-21 Giugno 2013: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire CECAM Congresso Internazionale: "*Many-dimensional quantum dynamics with (non)classical trajectories*", Lausanne, Switzerland; <http://www.cecarn.org/workshop-0-884.html>

TRASFERIMENTO TECNOLOGICO/SPIN OFF

1. Da maggio 2022: attraverso un finanziamento europeo Proof of Concept (POC) dell'European Research Council (ERC) ho avviato un processo di trasferimento tecnologico delle tecniche sviluppate nel mio progetto ERC Consolidator SEMICOMPLEX ad enti privati. Lo "stakeholder" iniziale è il laboratorio di nanomedicina biofotonica clinica Labion del Centro IRCCS S. Maria Nascente della Fondazione don Carlo Gnocchi ONLUS. ERC POC è un finanziamento riservato al trasferimento tecnologico dei contenuti di ricerca sviluppati nelle grant ERC. Nel mio caso il progetto consiste nello sviluppo di un software user-friendly per uso sia nel pubblico che nel privato di simulazioni e interpretazione di esperimenti di spettroscopia Raman e IR. **Un piano per testare il mercato e di individuazione del miglior processo di commercializzazione è stato proposto e approvato nel grant ed è in corso di esecuzione con la collaborazione dell'ufficio per il trasferimento tecnologico (TTO) di Ateneo.**

2. Dal 2015: **Multiwell**, software ad uso pubblico della Michigan Engineering, 1221 Beal Ave. Ann Arbor, MI 48109-2102 (USA). Il software permette di trasferire tutte le più recenti teorie e metodologie sviluppate dal mio gruppo di ricerca per il calcolo delle costanti cinetiche di reazione in fase gas alla comunità scientifica e al mondo del privato. Gli utenti sono principalmente chimici sperimentali e teorici della fase gas. Il software è protetto da licenza GPL. (<https://multiwell.engin.umich.edu/>)

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

DIREZIONE DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI

1. Da Maggio 2022 Direzione di un Gruppo di ricerca legato al progetto SEMISOFT finanziato come Proof of Concept (POC) dell'European Research Council (ERC) della Comunità Europea e dal titolo "*A web-platform interfaced software for spectroscopic molecular characterization and early diagnosis of Parkinson's disease*". Il gruppo di ricerca SEMISOFT è composto da 4 professori, 4 assegnisti, 1 tecnico. Durata 18 mesi.
2. 2015-2022 Direzione del progetto "SEMICOMPLEX" finanziato come Consolidator Grant (CoG) dell'European Research Council (ERC) della Comunità Europea e dal titolo "*Divide and conquer ab initio semiclassical molecular dynamics for spectroscopic calculations of complex systems*". Il gruppo di ricerca SEMICOMPLEX era composto da 4 professori, 1 ricercatore a tempo determinato di tipo A, 10 assegnisti di ricerca, e 5 studenti di dottorato. Durata 78 mesi. Il progetto ha originato 35 pubblicazioni.
3. 2018-2022 Direzione del progetto "Quantum Remediation - QURE" finanziato dal programma FARE del MIUR per lo sviluppo della dinamica molecolare semiclassica. Il gruppo di ricerca QURE era composto da 1 assegnista, 1 dottorando, e 1 collaboratore scientifico a contratto. Durata 4 anni. Il progetto ha originato 14 pubblicazioni.
4. 2016-2017 Direzione del progetto GREENTI (LISA) finanziato dalla Regione Lombardia in termini di CPU ore, dal titolo "*Quantum mechanical investigation of active TiO₂*". Il gruppo di ricerca era composto da 4 professori e numerosi studenti. Il progetto ha originato 8 pubblicazioni.
5. 2014-2015 Direzione del progetto SURGREEN (LISA) finanziato dalla Regione Lombardia in termini di CPU ore dal titolo "*Quantum mechanical investigation of active TiO₂-based interfaced*". Il gruppo di ricerca era composto da 4 professori e numerosi studenti. Il progetto ha originato 5 pubblicazioni.
6. 2013-2014 Direzione del progetto MATGREEN (LISA) finanziato dalla Regione Lombardia in termini di CPU ore dal titolo "*New titania materials for environmental remediation*". Il gruppo di ricerca era composto da 6 professori e numerosi studenti. Il progetto ha originato 3 pubblicazioni.

PARTECIPAZIONE A GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI

1. 2005-2006 Membro del gruppo di ricerca del Prof. G. Voth (University of Utah at Salt Lake City) per un progetto sullo sviluppo di teorie per l'accelerazione della dinamica molecolare classica finanziato dalla National Science Foundation of America.
2. 2000-2005 Membro del gruppo di ricerca del Prof. W. H. Miller (University of California at Berkeley) per un progetto sullo sviluppo teorico della dinamica molecolare semiclassica e della teoria dell'istantone finanziato dalla University of California e dal Lawrence Berkeley National Laboratory.
3. 2000 Membro del gruppo di ricerca del Prof. Delgado-Barrio e del prof. P. Villareal per un progetto sullo studio degli stati di Efimov e dei clusters di Neon finanziato dalla Comunità Europea per la mobilità europea dei ricercatori (European Training and Mobility Network per ricercatori)
4. 1998-2000 Membro del gruppo di ricerca del Prof. F. A. Gianturco come studente di tesi di laurea per lo studio delle intersezioni coniche nei sistemi molecolari.

ATTIVITÀ DI RESPONSABILE SCIENTIFICO DI ASSEGNI DI RICERCA O CONTRATTI DI RICERCA

1. 2020-2021 Marco Cazzaniga. Simulazioni quantistiche di strati di molecole d'acqua su superfici di titania. Collaboratore a contratto.
2. 2020-2021 Chiara D. Aieta. Calcolo di costanti cinetiche per reazioni organiche. Assegno di ricerca.
3. 2020-2021 Fabio Gabas. Simulazioni di spettri vibrazionali di biomolecole in ambiente acquoso. Assegno di ricerca.
4. 2019-2021 Chiara D. Aieta. Sviluppo di teorie semiclassiche per il calcolo delle funzioni d'onda vibrazionali e sviluppo del software MultiWell. Assegno di ricerca.
5. 2019-2020 Michele Gandolfi. Sviluppo di algoritmi machine learning per la dinamica semiclassica. Assegno di ricerca.
6. 2018-2020 Marco Cazzaniga. Simulazioni di spettri di assorbimento di acqua su titania. Collaboratore a contratto.
7. 2018-2019 Marco Micciarelli. Sviluppo di metodi semiclassici per il calcolo di spettri IR. Assegno di ricerca.
8. 2018-2020 Fabio Gabas. Simulazioni di spettri vibrazionali di biomolecole in ambiente fisiologico. Assegno di ricerca.
9. 2017-2019 Chiara D. Aieta. Sviluppo di teorie semiclassiche per il calcolo delle funzioni d'onda vibrazionali. Assegno di ricerca.
10. 2017-2019 Gianluca Bertaina. Sviluppo di metodi semiclassici per il calcolo di spettri di cluster molecolari. Assegno di ricerca.
11. 2016-2018 Marco Cazzaniga. Simulazioni quantistiche di assorbimento di molecole su superfici di titania. Il caso degli NOx. Assegno di ricerca.
12. 2016-2018 Marco Micciarelli. Sviluppo di teorie e metodi semiclassici per il calcolo della funzione d'onda vibrazionale. Assegno di ricerca.
13. 2017-2018 Jaime Suarez. Metodi esatti di griglia per il calcolo delle proprietà spettroscopiche di molecole. Assegno di ricerca.
14. 2017-2019 Riccardo Conte. Sviluppo di nuove teorie semiclassiche. Assegno di ricerca.
15. 2017-2018 Max Buchholz. Sviluppo di metodi semiclassici ibridi. Assegno di ricerca.
16. 2016-2017 Huaqing Li. Sviluppo di metodi semiclassici linearizzati. Assegno di ricerca.
17. 2016-2017 Agnes N. Mahmoud. Calcolo di molecole adsorbite su titania. Assegno di ricerca.
18. 2015-2017 Riccardo Conte. Sviluppo di nuovi metodi semiclassici. Assegno di ricerca.

INDIPENDENZA E LEADERSHIP SCIENTIFICA

Nella prima parte della mia carriera ho frequentato sia l'ambiente accademico italiano che quello internazionale, trascorrendo 6 anni e mezzo in prestigiose Università estere. Questo mi ha permesso di venire a contatto con ambienti scientifici diversi ma sempre di primo livello. Ritengo che l'aver frequentato in maniera estensiva e non solo sporadica differenti ambienti accademici sia molto utile per la completezza del curriculum di un docente universitario. Queste esperienze mi hanno sicuramente conferito un'elevata capacità di indipendenza scientifica, confermata e riconosciuta dall'ottenimento del grant ERC CoG 2014 "SEMICOMPLEX" che, grazie a un finanziamento di quasi 2 milioni di euro, mi ha permesso di sviluppare il mio personale gruppo di ricerca e di decidere in maniera indipendente le mie linee di ricerca. In questo modo ho potuto affinare anche le mie abilità manageriali e di coordinamento, perché ho dovuto gestire un gruppo formato da 8-10 persone a diversi livelli della loro carriera: dal tirocinante triennale al ricercatore RTD-A. L'indipendenza è proseguita grazie ad altri finanziamenti ottenuti sulla base dei risultati del grant ERC e di nuove idee. Tra questi vi sono il progetto "QURE" finanziato nell'ambito della *funding action* "FARE" del MUR e il più recente progetto "SEMISOFT" finanziato dall'ERC sotto la forma proof-of-concept (POC). È da rimarcare che **questi due ultimi finanziamenti sono stati vinti in competizione con altri vincitori di grant ERC**. Questo dimostra l'altissimo livello di selettività superato dai progetti di ricerca che ho sviluppato.

Tutti questi finanziamenti mi hanno permesso e continuano a permettermi di essere il Principal Investigator (PI), ovvero il leader, dei progetti che ho condotto e di costruire le mie collaborazioni in funzione dei progetti che guido. In altre parole, non ho collaborato allo sviluppo di idee e progetti pensati in tutto o in parte da altri, ma ho scelto le mie

collaborazioni con gruppi di ricerca con competenze complementari alle mie e in funzione degli argomenti di ricerca già fissati dai miei progetti finanziati. In questo contesto, ho sempre interpretato i miei finanziamenti alla ricerca e la mia indipendenza scientifica come una possibilità costruttiva per gettare ponti tra aree della chimica fisica, evitando di fare attività di ricerca avulsa dal contesto chimico fisico in cui ho vissuto.

COLLABORAZIONI SCIENTIFICHE

(in parentesi le pubblicazioni pertinenti e identificate dal numero dell'elenco di cui sotto)

- D. Marx (chimico teorico e computazionale, Bochum University, Germany): calcolo di frequenze vibrazionali per l'interpretazione degli spettri IR di biomolecole; (6)
- F. Grossman (fisico teorico, Technische Universität Dresden, Germany): sviluppo di propagatori semiclassici; (27, 31, 34, 44)
- L. Mino (chimico fisico sperimentale, Università di Torino): calcolo di spettri IR di NOx adsorbiti su superfici di TiO₂; (2)
- M. Havenith (chimico fisico sperimentale e spettroscopista) (Bochum University, Germany): calcolo di frequenze vibrazionali per l'interpretazione degli spettri IR di cluster molecolari; (6)
- A. Aspuru-Guzik (chimico teorico, Toronto University, Canada, e prima Harvard University, USA): calcoli ab initio per la dinamica semiclassica; (53, 62, 68, 69, 70)
- F. Finocchi (fisico della materia condensata, Institut des NanoSciences de Paris (INSP), CNRS and Sorbonne Université): calcoli spettroscopici vibrazionali per la fase condensata; (3, 10)
- John Barker (chimico dell'atmosfera, University of Michigan, Ann Arbor): sviluppo del software MultiWell per il calcolo delle costanti di reazione; (5, 26, 38, 40, 43)
- W. L. Hase (chimico computazionale) and Y. Zhuang (matematico) del Texas Tech University, USA: sviluppo di algoritmi per il calcolo della matrice Hessiana (23, 28, 55, 57)
- D. Tamascelli (informatico, Università degli Studi di Milano, Italy): sviluppo di codici di dinamica semiclassica su architetture GPU; (50)
- L. Lo Presti (cristallografo, Università degli Studi di Milano, Italy): calcoli ad onde piane (VASP, QE) e calcoli atom-centered (CRYSTAL) a livello DFT per composti fotocatalitici a base di TiO₂; (13, 35, 39, 47, 48, 51)
- G. Cappelletti, D. Meroni, V. Pifferi, e L. Falciola (elettrochimici, Università degli Studi di Milano): caratterizzazione elettrochimica di composti a base di titania per il rimedio ambientale; (13, 35, 39, 46, 47, 48, 51, 56, 58, 59, 60, 63, 65, 66)
- J. Schrier (chimico dei materiali, Haverford College, USA): arricchimento isotopico di He attraverso il tunneling risonante di membrane di grafene poroso; (49)
- M. Benaglia (chimico organico, Università degli Studi di Milano, Italy): calcoli di costanti cinetiche per superare il principio di Curtin-Hammett nella catalisi omogenea. (45)
- R. Conte (chimico teorico, UNIMI): nuove tecniche semiclassiche e sviluppo di potenziali accurati (4, 6, 7, 11)

Pertanto, le mie collaborazioni spaziano dall'informatica, alla chimica dei materiali; dalla chimica teorica pura, alla chimica fisica sperimentale, come penso debba essere un chimico fisico moderno.

IMPATTO DELLA MIA ATTIVITÀ DI MENTORING SULLA CARRIERA SCIENTIFICA DEI MEMBRI DEL MIO GRUPPO DI RICERCA

- 1 ex-membro del mio gruppo è Ricercatore permanente presso l'Istituto Nazionale di Ricerca Metrologica (Torino, Italia);
- 1 ex-membro del mio gruppo è Assistant Professor presso l'University of Washington (Seattle, USA);
- 1 ex-membro del mio gruppo di ricerca è Ricercatore a Tempo Determinato di Tipo B (UNIMI);
- 2 ex-membri del mio gruppo di ricerca è Ricercatore a Tempo Determinato di Tipo A (UNIMI e Bicocca);

- 1 ex-membro del mio gruppo è ricercatore di intelligenza artificiale presso il NASA Ames Research Center;
- 1 ex-membro del mio gruppo è ricercatore per la European Commission, Joint Research Centre (JRC), Ispra, Italy;
- 3 studenti del mio gruppo hanno vinto il premio “Italo Martina” del Rotary Club di Milano Duomo;
- 1 studente del mio gruppo ha vinto il premio della Fondazione Grazioli erogato dall’Istituto Lombardo di Scienze e Lettere per la miglior tesi di laurea magistrale;
- 1 studente di dottorato ha vinto il Premio Del Re della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana per la miglior tesi di dottorato;
- 1 studente triennalista ha vinto il premio internazionale i-REU – tra oltre 150 candidati - per il programma di ricerca estivo di 10 settimane “i-REU” rivolto a studenti triennalisti. Valore borsa ca 6000\$. Lo studente ha frequentato per 10 settimane l’Università di Rochester negli Stati Uniti.

ALTRI RUOLI ORGANIZZATIVI E/O DIRETTIVI ALL’INTERNO DELLA COMUNITÀ NAZIONALE/INTERNAZIONALE

- 2012-2019 Membro della European Grid Infrastructure (EGI, www.egi.eu), sottogruppo “CompChem” per la gestione e distribuzione delle risorse computazionali europee. EGI è stato finanziato dal Settimo Programma Quadro della Comunità Europea (**FP7**).
- Dal 2016: Sviluppatore ufficiale della suite di codici **Multiwell**. Codice diffuso soprattutto tra la comunità accademica di chimica fisica e dell’atmosfera, e che avvicina il chimico fisico sperimentale al calcolo. Il software è liberamente scaricabile previa citazione di J.R. Barker, T.L. Nguyen, J.F. Stanton, C. Aieta, M. Ceotto, F. Gabas, T.J.D. Kumar, C.G.L. Li, L.L. Lohr, A. Maranzana, N.F. Ortiz, J.M. Preses, J.M. Simmie, J.A. Sonk, and P.J. Stimac; MultiWell-2021 Software Suite; J. Barker, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA, 2021; <https://multiwell.engin.umich.edu/>

CONSEGUIMENTO DI PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER L’ATTIVITÀ DI RICERCA

- **Riconoscimento dell’European Research Council** (2 volte: ERC-2022-POC2-HORIZON; ERC-CoG 2014)
- **Hosting PI di progetti Marie Skłodowska-Curie non finanziati ma a cui è stato assegnato l’attestato “seal of excellence” della comunità europea** (4 volte: H2020-MSCA-IF-2016; H2020-MSCA-IF-2017; Horizon Europe-MSCA-GF-2021; Horizon Europe-MSCA-GF-2022)
- **Riconoscimento a livello internazionale come “Top Reviewer”** da Clarivate - Web of Science: <https://publons.com/researcher/1301181/michele-ceotto/>
- **Nomination per il “Mentoring Award”** di Nature (2013).
- **Riconoscimenti da case editrici:** nel 2022 la casa editrice World Scientific Publishing Co. ha descritto M. Ceotto come appartenente al “Who’s Who of world leaders in the field” del suo campo nel lancio del libro “Vibrational Dynamics of Molecules”.
- **Altri riconoscimenti ottenuti sulla base di CV e pubblicazioni scientifiche:**
 - 1) University of California at Berkeley (USA): Fellowship per gli studenti stranieri per svolgere il Ph.D. in Chimica ottenuto in base alla competizione internazionale GRE (Graduate Record Examinations), GRE Topic, TOEFL and TSE, somministrati da ETS (Educational Testing School) (2000-2005).
 - 2) Fellowship emessa dal “Consiglio Nazionale delle Ricerche” (CNR) per studi all’estero (2000).
 - 3) European Union Training and Mobility for Researchers (TMR) Fellowship presso il Consejo Superior de las Investigaciones Científicas (CSIC) e presso l’“Istituto de Matematicas y Física Fundamental” (IMAFF), Prof.s Garcia-Vela and Delgado-Barrio, Madrid (Spain, 2000).

RICONOSCIMENTI RICEVUTI DA RIVISTE INTERNAZIONALI PER I RISULTATI DELL'ATTIVITÀ DI RICERCA

- Chemical Science (IF 9,346): F. Gabas, G. Di Liberto, R. Conte*, **M. Ceotto*** "Protonated Glycine Supramolecular Systems: The Need for Quantum Dynamics", *Chem. Sci.* 9, 7894 (2018). "Pick of the week" del Chemical Science.
- "Cover of the Chemical Science" (IF 9,346) per l'articolo F. Gabas, G. Di Liberto, R. Conte*, **M. Ceotto***, "Protonated Glycine Supramolecular Systems: The Need for Quantum Dynamics", *Chem. Sci.* 9, 7894 (2018). Scelto per essere rappresentato sulla front cover del fascicolo della rivista e oggetto di approfondimento tramite press release del Chemical Science.
- Chemical Science (IF 9,346): A. Rognoni, R. Conte, **M. Ceotto*** "How many water molecules are needed to solvate one?" *Chem. Sci.* 12, 2060 (2021). "Altmetric index" = 50. Scelto dal Chemical Science come 2021 HOT Article ed è risultato tra i "Most popular 2021 physical and theoretical chemistry articles". Oggetto di approfondimento giornalistico sulla rivista Chemistry World della RSC, dove è risultato l'articolo più letto nella settimana 22-28 gennaio 2021. Oggetto di NEWS sul sito dell'Università degli Studi di Milano - LaStatale NEWS. Recensito anche su altra NEWS outlet, 2 blog scientifici internazionali e 36 tweeters. Questa pubblicazione ha avuto una particolare attenzione mediatica come riportato dal coefficiente altimetrico tanto che è risultata tra i top 5% di quelle mai tracciate con un coefficiente altimetrico. Per dettagli: <https://rsc.altmetric.com/details/97486945#score>
- Nature Communications (IF 17,694): C. Aieta, M. Micciarelli, G. Bertaina, and **M. Ceotto***, "Anharmonic quantum nuclear densities from full dimensional vibrational eigenfunctions with application to protonated glycine", *Nature Communications* **11**(1), 1-9 (2020); Articolo oggetto di approfondimento della sezione "Behind the scene" della Chemistry Community di Nature e in evidenza sul sito dell'Università degli Studi di Milano - LaStatale NEWS.

ALTRO

- Dal 2006 membro della Società Chimica Italiana (SCI). Divisione di Chimica Teorica e Computazionale.
- Dal 2002 membro della American Chemical Society (ACS). Divisione di "Physical Chemistry".
- 1992-1999 borsista della Federazione Italia dei "Cavalieri del Lavoro": circa 15 borse di studio premio annue nazionali per svolgere gli studi universitari presso il Collegio "Lamaro-Pozzani" della Federazione Nazionale dei Cavalieri del Lavoro sito in Roma, dove gli ospiti seguono corsi aggiuntivi di formazione di economia e diritto, oltre ad incontrare periodicamente personalità importanti della società italiana. Le borse includono anche la completa copertura dei costi di studi universitari di vitto e alloggio.

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

1. D. Moscato, R. Conte*, **M. Ceotto***, "Vibrational spectroscopy simulation of solvation effects on a G-quadruplex", *J. Biomol. Struct. Dyn.*, accepted, doi.org/10.1080/07391102.2023.2180435 (2023); IF=5.235
2. L. Mino*, M. Cazzaniga, F. Moriggi, **M. Ceotto***, Elucidating NOx Surface Chemistry at the Anatase (101) Surface in TiO2 Nanoparticles", *J. Phys. Chem. C* **127**, 437-449 (2023); IF= 4.177
3. M. Cazzaniga*, M. Micciarelli, F. Gabas, F. Finocchi, **M. Ceotto***, "Quantum Anharmonic Calculations of Vibrational Spectra for Water Adsorbed on Titania Anatase(101) Surface: Dissociative versus Molecular Adsorption", *J. Phys. Chem. C* **126**, 12060-12073 (2022); IF=4.177
4. F. Gabas, R. Conte, **M. Ceotto***, "Quantum Vibrational Spectroscopy of Explicitly Solvated Thymidine in Semiclassical Approximation", *J. Phys. Chem. Lett.* **13** (5), 1350-1355 (2022); IF=6.888

5. G. Mandelli, C. Aieta, and **M. Ceotto***, "Heavy Atom Tunneling in Organic Reactions at Coupled Cluster Potential Accuracy with a Parallel Implementation of Anharmonic Constant Calculations and Semiclassical Transition State Theory", *J. Chem. Theory Comput.* **18** (2), 623-637 (2022); IF=6.578
6. G. Schwaab, R. Pérez de Tudela, D. Mani, N. Pal, T. Kumar Roy, F. Gabas, R. Conte, L. Durán Caballero, **M. Ceotto**, D. Marx, M. Havenith*, "Zwitter Ionization of Glycine at Outer Space Conditions due to Microhydration by Six Water Molecules", *Phys. Rev. Lett.* **128** (3), 033001 (2022); IF=9.185
7. G. Botti, **M. Ceotto**, and R. Conte*, "On-the-fly adiabatically switched semiclassical initial value representation molecular dynamics for vibrational spectroscopy of biomolecules", *J. Chem Phys.* **155**, 234102 (2021); IF=4.3
8. M. Gandolfi and **M. Ceotto***, "Unsupervised Machine Learning Neural Gas Lagorithm for Accurate Evaluations of the Hessian Matrix in Molecular Dynamics", *J. Chem. Theory Comput.* **17** (11), 6733-6746 (2021); IF=6.578
9. M. Ceotto, "Qual è la più piccola goccia d'acqua?", Istituto Lombardo - Accademia di Scienze e Lettere - Rendiconti di Scienze, **155** (2021)
<https://doi.org/10.4081/scienze.2021.764>;
10. E. Fallacara, P. Depondt, S. Huppert, **M. Ceotto***, F. Finocchi, "Thermal and Nuclear Quantum Effects at the Antiferroelectric to Paraelectric Phase Transition in KOH and KOD Crystals", *J Phys. Chem. C* **125** (40), 22328-22334 (2021); IF=4.177
11. A. Rognoni, R. Conte, and **M. Ceotto***, "Caldeira-Leggett model vs ab initio potential: A vibrational spectroscopy test of water solvation", *J. Chem. Phys.* **154**, 094106 (2021); IF=4.3
12. A. Rognoni, R. Conte, and **M. Ceotto***, "How many water molecules are needed to solvate one?", *Chem. Sci.* **12**, 2060 (2021) (featured in *Chemistry World*) Altmetric index 47; IF=9.969
13. L. Lo Presti, V. Pifferi, G. Di Liberto, G. Cappelletti, L. Falciola, G. Cerrato and **M. Ceotto***, "Direct measurement and modeling of spontaneous charge migration across anatase-brookite nanoheterojunctions", *J. Mater. Chem. A* **9**, 7782-7790 (2021); IF=14.5
14. C. Aieta, M. Micciarelli, G. Bertaina, and **M. Ceotto***, "Representing molecular ground and excited vibrational eigenstates with nuclear densities obtained from semiclassical initial value representation molecular dynamics", *J. Chem. Phys.* **153**, 214117 (2020); IF=4.3
15. M. Gandolfi, A. Rognoni, C. Aieta, R. Conte, and **M. Ceotto***, "Machine learning for vibrational spectroscopy via divide-and-conquer semiclassical initial value representation molecular dynamics with application to N-methylacetamide", *J. Chem. Phys.* **153**, 204104 (2020); IF=4.3
16. C. Aieta, M. Micciarelli, G. Bertaina, and **M. Ceotto***, "Anharmonic quantum nuclear densities from full dimensional vibrational eigenfunctions with application to protonated glycine", *Nature Communications* **11**(1), 1-9 (2020); IF=17.69
17. F. Gabas, R. Conte, and **M. Ceotto***, "Semiclassical Vibrational Spectroscopy of Biological Molecules Using Force Fields", *Journal of Chemical Theory and Computation* **16**(6), 3476-3485 (2020); IF=6.578
18. M. Cazzaniga, M. Micciarelli, F. Moriggi, A. Mahmoud, F. Gabas, and **M. Ceotto***, "Anharmonic calculations of vibrational spectra for molecular adsorbates: A divide-and-conquer semiclassical molecular dynamics approach", *Journal of Chemical Physics* **152**, 104104 (2020); IF=4.3
19. R. Conte*, G. Botti, and **M. Ceotto**, "Sensitivity of semiclassical vibrational spectroscopy to potential energy surface accuracy: A test on formaldehyde", *Vibrational Spectroscopy* **106**, 103015 (2020); IF=2.382
20. R. Conte*, L. Parma, C. Aieta, A. Rognoni, and **M. Ceotto***, "Improved semiclassical dynamics through adiabatic switching trajectory sampling", *Journal of Chemical Physics* **151**, 214107 (2019); IF=4.3
21. G. Bertaina, G. Di Liberto, and **M. Ceotto***, "Reduced rovibrational coupling Cartesian dynamics for semiclassical calculations: Application to the spectrum of the Zundel cation", *Journal of Chemical Physics* **151**, 114307 (2019); IF=4.3
22. R. Conte*, F. Gabas, G. Botti, Y. Zhuang*, and **M. Ceotto***, "Semiclassical vibrational spectroscopy with Hessian databases", *Journal of Chemical Physics* **150**, 244118 (2019); IF=4.3

23. F. Gabas, G. Di Liberto, and **M. Ceotto***, "Vibrational investigation of nucleobases by means of divide and conquer semiclassical dynamics", *Journal of Chemical Physics* **150**, 224107 (2019); IF=4.3
24. M. Micciarelli*, F. Gabas, R. Conte, and **M. Ceotto***, "An effective semiclassical approach to IR spectroscopy", *Journal of Chemical Physics* **150**, 184113 (2019); IF=4.3
25. C. Aieta, F. Gabas, **M. Ceotto***, "A Parallel Implementation of Semiclassical Transition State Theory", *J. Chemical Theory and Computation* **15**, 2142-2153 (2019); IF=6.578
26. M. Buchholz, E. Fallacara, F. Gottwald, M. Ceotto, F. Grossmann, and S. D. Ivanov, "Herman-Kluk propagator is free from zero-point energy leakage", *Chemical Physics* **515**, 231-235 (2018); IF=2.552
27. X. Ma, G. Di Liberto, R. Conte, W. L. Hase*, and **M. Ceotto***, "A quantum mechanical insight into S_N2 reactions: Semiclassical initial value representation calculations of vibrational features of the Cl⁻...CH₃Cl pre-reaction complex with the VENUS suite of codes", *Journal of Chemical Physics* **149**, 164113 (2018); IF=4.3
28. F. Gabas, G. Di Liberto, R. Conte*, and **M. Ceotto***, "Protonated glycine supramolecular systems: the need for quantum dynamics", *Chemical Science* **9** (41), 7885-8026 (2018); This article is part of the themed collections: 2018 ChemSci Pick of the Week Collection, 2018 Chemical Science HOT Article Collection and journal cover; IF=9.969
29. M. Micciarelli*, R. Conte, J. Suarez, and **M. Ceotto***, "Anharmonic vibrational eigenfunctions and infrared spectra from semiclassical molecular dynamics", *Journal of Chemical Physics* **149**, 064115 (2018); IF=4.3
30. M. Buchholz, F. Grossmann, and **M. Ceotto***, "Simplified approach to the mixed time-averaging semiclassical initial value representation for the calculation of dense vibrational spectra", *Journal of Chemical Physics* **148**, 114107 (2018); IF=4.3
31. G. Di Liberto, R. Conte, and **M. Ceotto***, "Divide and conquer" semiclassical molecular dynamics: An application to water clusters", *Journal of Chemical Physics* **148**, 104302 (2018); IF=4.3
32. G. Di Liberto, R. Conte, and **M. Ceotto***, "Divide and conquer" semiclassical molecular dynamics: A practical method for spectroscopic calculations of high dimensional molecular systems", *Journal of Chemical Physics* **148**, 014307 (2018); IF=4.3
33. M. Buchholz, F. Grossmann, and **M. Ceotto***, "Application of the mixed time-averaging semiclassical initial value representation method to complex molecular spectra", *Journal of Chemical Physics* **147**, 164110 (2017); IF=4.3
34. G. Di Liberto, V. Pifferi, L. Lo Presti*, **M. Ceotto***, and L. Falciola*, "Atomistic Explanation for Interlayer Charge Transfer in Metal-Semiconductor Nanocomposites: The Case of Silver and Anatase", *Journal of Physical Chemistry Letters* **8**, 5372-5377 (2017); IF=6.888
35. **M. Ceotto***, G. Di Liberto, and R. Conte, "Semiclassical "Divide-and-Conquer" Method for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems", *Phys. Rev. Lett.* **119**, 010401 (2017); IF=9.185
36. F. Gabas, R. Conte, and **M. Ceotto***, "On-the-fly ab initio Semiclassical Calculation of Glycine Vibrational Spectrum", *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 2378-2388 (2017); IF=6.578
37. C. Aieta, **M. Ceotto***, "A quantum method for thermal rate constant calculations from stationary phase approximation of the thermal flux-flux correlation function integral", *J. Chem. Phys.* **146**, 214115 (2017); IF=4.3
38. D. Meroni*, L. Lo Presti*, G. Di Liberto, **M. Ceotto***, R. G. Acres, K. C. Prince, R. Bellani, G. Soliveri, and S. Ardizzone, "A Close Look at the Structure of the TiO₂-APTES Interface in Hybrid Nanomaterials and Its Degradation Pathway: An Experimental and Theoretical Study", *J. Phys. Chem C*, **121**, 430-440 (2017); IF=4.177
39. JR Barker, TL Nguyen, JF Stanton, C Aieta, M Ceotto, F Gabas, TJD Kumar, CGL Li, LL Lohr, A Maranzana, NF Ortiz, JM Preses, JM Simmie, JA Sonk, PJ Stimac, MultiWell-2017 Software Suite, Ann Arbor, Michigan (2017)
40. G. Di Liberto, **M. Ceotto***, "The importance of the pre-exponential factor in semiclassical molecular dynamics", *J. Chem. Phys.* **145**, 144107 (2016); IF=4.3
41. C. Aieta, G. Di Liberto, F. Gabas, R. Conte, and **M. Ceotto***, "Theoretical chemistry and sustainable growth: A trip on board of a nano-engine conducted by Martin Karplus", *Nuova Energia* **2**, (2016).

42. C. Aieta, F. Gabas, **M. Ceotto***, "An Efficient Computational Approach for the Calculation of the Vibrational Density of States", *J. Phys. Chem. A* **120** (27), 4853-4862 (2016); IF=2.944
43. M. Buchholz, F. Grossmann, **M. Ceotto***, "Mixed semiclassical initial value representation time-averaging propagator for spectroscopic calculations", *J. Chem Phys.*, **144**, 094102 (2016); IF=4.3
44. M. Orlandi, **M. Ceotto***, M. Benaglia*, "Kinetics versus thermodynamics in the proline catalyzed aldol reaction", *Chemical Science* **7** (8), 5421-5427 (2016); IF=9.969
45. L. Rimoldi, C. Ambrosi, G. Di Liberto, L. Lo Presti, **M. Ceotto**, C. Oliva, D. Meroni, S. Cappelli, G. Cappelletti, G. Soliveri, S. Ardizzone, "Impregnation versus Bulk Synthesis: How the Synthetic Route Affects the Photocatalytic Efficiency of Nb/Ta:N Codoped TiO₂ Nanomaterials", *J. Phys. Chem C*, **119**, 24104-24115 (2015); IF=4.177
46. F. Spadavecchia*, **M. Ceotto**, L. Lo Presti, C. D. Aieta, I. Biraghi, D. Meroni, S. Ardizzone, G. Cappelletti, "Second Generation Nitrogen Doped Titania Nanoparticles: A Comprehensive Electronic and Microstructural Picture", *Chi. J. of Chemistry*, **32** (12), 1195-1293 (2014); IF=5.56
47. C. Marchiori, G. Di Liberto, G. Soliveri, L. Loconte, L. Lo Presti*, D. Meroni*, **M. Ceotto**, C. Oliva, S. Cappelli, G. Cappelletti, C. Aieta, S. Ardizzone, "Unraveling the Cooperative Mechanism of Visible-light Absorption in Bulk N, Nb Codoped TiO₂ Powders of Nanomaterials", *J. Phys. Chem C*, **118**, 24152-24164 (2014); IF=4.177
48. S. Mandrà, J. Schrier, **M. Ceotto***, "Helium Isotope Enrichment by Resonant Tunneling Through Nanoporous Graphene Bilayers" *J. Phys. Chem. A*, **118** (33), 6457-6465 (2014); IF=2.944
49. D. Tamascelli, F.S. Dambrosio, R. Conte, **M. Ceotto***, "Graphics Processing Units Accelerated Semiclassical Initial Value Representation Molecular Dynamics", *J. Chem Phys.*, **140**, 174109 (2014); IF=4.3
50. L. Lo Presti*, **M. Ceotto**, F. Spadavecchia, G. Cappelletti, D. Meroni, R.A. Acres, S. Ardizzone, "Role of the Nitrogen Source in Determining Structure and Morphology of N-Doped Nanocrystalline TiO₂", *J. Phys. Chem C*, **118**, 4797-4807 (2014); IF=4.177
51. **M. Ceotto***, C. Manuali, A. Manfredi, "Massive implementation of the European Chemistry Test at University of Milan", Virtual Innovation, Research, Teaching & Learning Communities. - ISSN 2279-8773. - 4 (2013);
52. R. Conte, A. Aspuru-Guzik, **M. Ceotto***, "Reproducing Deep Tunneling Splittings, Resonances, and Quantum Frequencies in Vibrational Spectra From a Handful of Direct Ab Initio Semiclassical Trajectories", *J. Phys. Chem. Lett.*, **4**, 3407-3412 (2013); IF=6.888
53. S. Mandrà, S. Valleau, **M. Ceotto***, "Deep Nuclear Resonant Tunneling Thermal Rate Constant Calculations", *Int. J. of Quantum Chemistry*, **113** (12), 1722-1734 (2013); IF=2.437
54. **M. Ceotto***, Y. Zhuang, W.L. Hase, "Accelerated direct semiclassical molecular dynamics using a compact finite difference Hessian scheme", *J. Chem. Phys.* **138**, 054116 (2013); IF=4.3
55. F. Spadavecchia*, S. Ardizzone, G. Cappelletti, L. Falciola, **M. Ceotto**, D. Lotti, "Investigation and optimization of photocurrent transient measurements on nano-TiO₂", *J. of Applied Electrochem.* **43** (2), 217-225 (2013); IF=2.925
56. Y. Zhuang*, M. R. Siebert, W.L. Hase, K.G. Kay, **M. Ceotto***, "Evaluating the Accuracy of Hessian Approximations for Direct Dynamics Simulations" *J. Chem. Theory and Computation*, **9** (1), 54-64 (2013); IF=6.578
57. G. Cappelletti*, S. Ardizzone, D. Meroni, G. Soliveri, **M. Ceotto**, C. Biaggi, M. Benaglia, L. Raimondi, "Wettability of bare and fluorinated silanes: A combined approach based on surface free energy evaluations and dipole moment calculations", *J. of Colloid and Interface Science* **389**, 284-291 (2013); IF=9.965
58. F. Spadavecchia*, G. Cappelletti, S. Ardizzone, **M. Ceotto**, M. S. Azzola, L. Lo Presti, G. Cerrato, L. Falciola, "Role of Pr on the Semiconductor Properties of Nanotitania. An Experimental and First-Principles Investigation", *J. Phys. Chem C* **116** (43), 23083-23093 (2012) IF=4.177
59. **M. Ceotto***, L. Lo Presti*, G. Cappelletti, D. Meroni, F. Spadavecchia, R. Zecca, M. Leoni, P. Scardi, S. Ardizzone, "About the Nitrogen Location in Nanocrystalline N-Doped TiO₂: Combined DFT and EXAFS Approach" *J. Chem. Phys. C* **116** (2), 1764-1771, (2012); IF=4.177

60. **M. Ceotto***, "Vibration-assisted tunneling: a semiclassical instanton approach", *Mol. Phys.* **110** (9-19), Special Issue 547-559 (2011) IF=1.937
61. **M. Ceotto***, G.F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik, "Fighting the curse of dimensionality in first-principles semiclassical calculations: Non-local reference states for large number of dimensions", *J. Chem. Phys.* **135** (21), 214108 (2011); IF=4.3
62. D. Meroni*, S. Ardizzone, G. Cappelletti, **M. Ceotto**, M. Ratti, R. Annunziata, M. Benaglia, L. Raimondi, "Interplay between Chemistry and Texture in Hydrophobic TiO₂ Hybrids", *J. Chem. Phys. C* **115** (38), 18649-18658 (2011); IF=4.177
63. **M. Ceotto***, S. Valleau, G.F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik, "First principles semiclassical calculations of vibrational eigenfunctions", *J. Chem. Phys.* **134** (23), 234103 (2011); IF=4.3
64. F. Spadavecchia*, G. Cappelletti, S. Ardizzone, **M. Ceotto**, L. Falciola, "Electronic Structure of Pure and N-Doped TiO₂ Nanocrystals by Electrochemical Experiments and First Principles Calculations", *J. Phys. Chem. C* **155** (14), 6381-6391 (2011); IF=4.177
65. D. Meroni*, S. Ardizzone, G. Cappelletti, C. Oliva, **M. Ceotto**, D. Poelman, H. Poelman, "Photocatalytic removal of ethanol and acetaldehyde by N-promoted TiO₂ films: The role of the different nitrogen sources", *Catalysis Today* **161** (1), 169-174 (2011); IF=6.562
66. **M. Ceotto***, D. Dell'Angelo, G.F. Tantardini, "Multiple coherent states semiclassical initial value representation spectra calculations of lateral interactions for CO on Cu(100)", *J. Chem. Phys.* **133** (5), 054701 (2010); IF=4.3
67. **M. Ceotto***, S. Atahan, G. F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik, "Multiple coherent states for first-principles semiclassical initial values representation molecular dynamics", *J. Chem. Phys.* **130**, 234113 (2009); IF=4.3
68. **M. Ceotto***, S. Atahan, S. Shim, G. F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik, "First-principles semiclassical initial value representation molecular dynamics", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, 3861 (2009); IF=3.945
69. **M. Ceotto***, G. F. Tantardini, S. Atahan, A. Aspuru-Guzik, "First-principles implementation of semiclassical initial value representation molecular dynamics", *Multidimensional Quantum Mechanics with Trajectories*, pg.s-8-16, Ed. D. Shalashilin and M. Miranda (CCP6, University of Leeds, 2008) ISBN 978-0-9545289-8-0
70. **M. Ceotto**, G. S. Ayton, G. A. Voth*, "Accelerated Superposition State Molecular Dynamics for Condensed Phase Systems", *J. Chem. Theory Comput.* **4**, 560 (2008). IF= 6.578
71. M. Ceotto "Semiclassical and Quantum Instanton approximations for thermal rate constants of chemical reactions", Ph.D. Dissertation Thesis (337 pages), edit by the "University of California at Berkeley" (copyright © 2005 by Michele Ceotto).
72. **M. Ceotto**, S. Yang, W. H. Miller*, "Quantum reaction rate from higher derivatives of the thermal flux-flux autocorrelation function at time zero" *J. Chem. Phys.* **122**, 044109 (2005). IF=4.3
73. **M. Ceotto**, W. H. Miller*, "Test of the quantum instanton approximation for thermal rate constants for some collinear reactions" *J. Chem. Phys.* **120**, 6356 (2004). IF=4.3
74. W. H. Miller*, Y. Zhao, **M. Ceotto**, S. Yang, "Quantum instanton approximation for thermal rate constants of chemical reactions" *J. Chem. Phys.* **119**, 1329 (2003). IF=4.3
75. **M. Ceotto**, A. García-Vela*, "A reduced-dimensionality quantum model which incorporates the full-dimensional energy of the system. Application to the vibrational predissociation of Cl₂-Ne₂" *J. Chem. Phys.* **115**, 2146 (2001). IF=4.3
76. **M. Ceotto**, F. A. Gianturco*, "Internal coordinate couplings and symmetry properties: the search of a conical seam in the protonated oxygen", *J. Phys. Chem. A* **105**, 5197 (2001). IF=2.944
77. **M. Ceotto**, F. A. Gianturco*, "Gas-phase proton affinity of ozone: a computational test of the experimental mechanism" *J. Mol. Struct.-Theochem* **543**, 115 (2001). IF=3.841
78. **M. Ceotto**, F. A. Gianturco*, "Charge-transfer effects in the gas-phase protonation of ozone: locating the conical intersections" *J. Chem. Phys.* **112**, 5820 (2000) 13. IF=4.3
79. **M. Ceotto**, F. A. Gianturco, D. M. Hirst*, "Protonated ozone: structures, energetics and nonadiabatic effects" *J. Phys. Chem. A* **103**, 9984 (1999) 48. IF=2.944

CAPITOLI DI LIBRO

- R. Conte*, and **M. Ceotto***, "Semiclassical molecular dynamics for spectroscopic calculations", capitolo di libro in *Quantum Chemistry and Dynamics of Excited States: Methods and Applications*, Wiley Online Library 595-628 (2020);
- R. Conte*, and **M. Ceotto***, "Semiclassical vibrational dynamics for molecular and supra-molecular systems" capitolo di libro in *Vibrational Dynamics of Molecules*, World Scientific Publishing Co, 379-415 (2022)

INDICATORI BIBLIOMETRICI (AL 24/03/2023)

- Età Accademica: **24**
- Numero totale di pubblicazioni su riviste internazionali peer reviewed: **73**
- Capitoli di libro pubblicati (Book Chapter): **2**
- Numero di pubblicazioni su riviste internazionali come primo o ultimo o autore corrispondente: **61**. Quindi per l'83% delle mie pubblicazioni sono primo o ultimo o autore corrispondente.
- Impact factor totale: **381**; Impact factor medio: **5.22**
- Numero totale di citazioni: **2768** (G scholar); **2039** (scopus)
- h-index: **34** (G scholar); **29** (scopus); h-index dal 2018: **28** (G. scholar)
- i-10-index: **63** (G scholar); i-10-index dal 2018: **58** (G scholar)
- Numero pubblicazioni su rivista ultimi 5 anni (2018-2023): **31** (AIR UNIMI, Simulazione ASN)
- Numero pubblicazioni su rivista ultimi 10 anni (2013-2023): **53** (AIR UNIMI, Simulazione ASN)
- Numero di citazioni ultimi 15 anni: **1773** (AIR UNIMI, Simulazione ASN)
- h-index ultimi 15 anni (2007-2022): **28** (AIR UNIMI, Simulazione ASN)

Questi parametri sono ampiamente sopra le 3 soglie richieste ai Commissari ASN.

ATTIVITÀ GESTIONALI, ORGANIZZATIVE E DI SERVIZIO

COMPONENTE DELLE COMMISSIONI DI DIPARTIMENTO (UNIMI)

1. Membro della Commissione Valutazione e Programmazione del Dipartimento di Chimica dal 2012 al 2017.
2. Membro della Commissione Didattica del Dipartimento di Chimica dal 2012 al 2017.
3. Membro della Commissione di Orientamento dal 2011 ad oggi.
4. Presidente della Commissione EChem-test che si coordina con la Commissione Accesso Lauree Magistrali in Scienze Chimiche e Industrial Chemistry

COMPONENTE DI COLLEGI DI SCUOLA DI DOTTORATO (UNIMI)

Membro del Collegio di Dottorato della Scuola di Dottorato in Chimica dal 2012 ad oggi.

COMPONENTE DI COLLEGI DIDATTICI (UNIMI)

Membro del Collegio Didattico in Chimica dal 2006 ad oggi.

MEMBRO DI COMMISSIONI DI PROCEDURE DI SELEZIONE PER POSIZIONI ACCADEMICHE

Anno 2019: Membro della Commissione per la procedura selettiva pubblica per la copertura di un posto di ricercatore universitario a tempo determinato nel settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, Settore Scientifico-Disciplinare CHIM/02 (Codice Concorso 4036).

MEMBRO DI COMMISSIONI DI PROCEDURE DI SELEZIONE PER L'ATTRIBUZIONE DI TITOLI ACCADEMICI PRESSO ENTI STRANIERI

1. 2021 Membro esterno della Commissione di esame finale di dottorato per l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Svizzera.
2. 2016 Membro esterno della Commissione di esame finale di dottorato per l'Università Pierre et Marie Curie, Institut de Nanoscience de Paris, Francia.
3. 2015 Membro esterno della Commissione di esame finale di dottorato per l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Svizzera.
4. 2014 Membro esterno della Commissione di esame finale di Master per l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Svizzera.
5. 2010 Membro esterno della Commissione di esame finale di Master per l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Svizzera.

MEMBRO DI COMMISSIONI NAZIONALI O INTERNAZIONALI DI PROCEDURE DI SELEZIONE PER L'ATTRIBUZIONE DI FINANZIAMENTI ALLA RICERCA COME VALUTATORE

1. Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MUR): "Progetti di Rilevante Interesse Nazionale" (PRIN). Progetti valutati: 3 nel 2021, 1 nel 2017 e 4 nel 2016.
2. Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MUR): "Futuro in Ricerca" (FIRB). Anno 2013.
3. Agenzia Nazionale di Valutazione del Sistema Universitario e della Ricerca (ANVUR): "Valutazione della Qualità della Ricerca" (VQR 2015-19);
4. Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MUR): Fondo Integrativo Speciale per la Ricerca: (FISR 2020 COVID-19);

5. Eidgenoessische Technische Hochschule Zurich (ETH, Politecnico Federale di Zurigo): valutazione di "Grant Research Proposals";
6. Fondazione Nazionale per lo Sviluppo Scientifico e Tecnologico (Fondecyt Science Council - Conycyt), Cile: valutazione di progetti di ricerca. Anno 2018.
7. Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM): valutazioni di finanziamenti per possibili congressi;
8. Istituto per il calcolo e il "data science" (ISCD) della Sorbonne Université: valutazione di progetti scientifici. Anno 2019.
9. Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MUR): "Scientific Independence of young Researchers" (SIR). Anno 2014.
10. Narodowe Centrum Nauki (Centro Nazionale di Scienza della Polonia): "Preludium-20". Valutazione di progetti di ricerca. Anno 2021.
11. Università degli Studi dell'Insubria: "Bando per l'erogazione del Fondo per ricercatori a tempo determinato". Anno 2022. 12 progetti valutati.
12. Vidi 2022 (Dutch Research Council, NL);
13. Valutazione di tenure-track di colleghi per conto di Università estere.

ATTIVITÀ ORGANIZZATIVE E DI SERVIZIO

- Ingresso alle Lauree Magistrali in Chimica e Industrial Chemistry. Come attività di servizio al Dipartimento di Chimica e al Collegio Didattico, ogni anno mi occupo di organizzare e correggere i test di ingresso basato sulle quattro tematiche chimica fisica, organica, inorganica e analitica per l'ingresso al corso di studi magistrale in Scienze Chimiche e, in aggiunta alle precedenti, di Chemical Engineering per l'ingresso al corso di studi magistrale in Industrial Chemistry. Ogni anno un totale di circa 120 studenti effettuano i test. I risultati sono inoltrati alla Commissione di Ingresso alle lauree Magistrali per il colloquio e la selezione finale. Attività effettuata ogni anno dal 2013.
- Su richiesta dell'Ateneo e in collaborazione con l'Officina Horizon Europe, sono membro della Commissione che prepara i docenti UNIMI selezionati ad affrontare la prova orale che dovranno superare per ottenere un grant ERC (dal 2015).

CORSO DI AGGIORNAMENTO PER LE ATTIVITÀ GESTIONALI DI LABORATORIO

1. "Formazione specifica Responsabili attività di didattica e/o di ricerca di laboratorio (RADRL)" erogato da Aware Lab Learn, 13 - 14 luglio 2021 (8 ore).
2. "Formazione particolare aggiuntiva Responsabile attività di didattica e/o di ricerca di laboratorio (RADRL)" erogato da Aware Lab Learn, 14-15 settembre 2021 (8 ore).

ATTIVITÀ DI TERZA MISSIONE

1. **Piano Lauree Scientifiche (PLS):** dal 2011 responsabilità, creazione e sviluppo del Test di Autovalutazione (attività obbligatoria PLS secondo le direttive MIUR) in chimica composto da un database di circa 500 domande. Ho pensato questo test con il fine di aiutare gli studenti delle scuole superiori a verificare e sviluppare attraverso la modalità autovalutativa le proprie *competenze*, discostandomi dall'approccio didattico tradizionale incentrato sulla verifica delle conoscenze. Ho ottenuto questo obiettivo creando con l'aiuto di numerosi dottorandi in Chimica un database di domande in cui il pool di domande è estremamente ampio e con immagini esplicative. Il test viene regolarmente eseguito da remoto o presso le scuole superiori lombarde da circa un migliaio di studenti ogni anno. In questa attività sono coadiuvato da un PLS Officer, una figura a contratto su fondi PLS, che visita le scuole superiori, introduce al test e si occupa di supervisionarne l'esecuzione. Il sito web del test si trova presso quello PLS di UNIMI:
<https://labonline.ctu.unimi.it/course/view.php?id=362§ionid=3845#section-2>

2. **Produzione di video di divulgazione scientifica:** nel 2019 ho ideato e sviluppato un video a carattere altamente divulgativo sulla chimica fisica molecolare e il mio progetto di ricerca ERC SEMICOMPLEX mediante il supporto tecnico del CTU (Centro per l'Innovazione Didattica e le Tecnologie Multimediali) dell'Università degli Studi di Milano. Il video è stato finanziato da Fondazione Cariplo e Regione Lombardia. Il video accosta l'arte della Fuga in musica con la razionalizzazione dei moti molecolari. Il video è consultabile presso: <https://video.unimi.it/media/1770/>.
3. **"Marinella Ferrari" summer school:** dal 2016, con cadenza annuale, partecipo come docente a questa scuola estiva di orientamento e terza missione erogata attraverso attività didattiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Milano. Io mi occupo di illustrare e somministrare l'Echem Test per le scuole superiori.
4. **Organizzazione di una "Nobel Lecture":** 8 Aprile 2016. Nobel Lecture tenuta dal Prof. Martin Karplus (Harvard University). Ho organizzato l'evento a carattere pubblico presso l'aula Magna dell'Università degli Studi di Milano consistente nella lezione divulgativa del premio Nobel per la Chimica 2013 Martin Karplus. All'evento hanno partecipato colleghi, studenti universitari, studenti delle scuole superiori lombarde e delle scuole secondarie di primo grado milanesi per un totale di circa un migliaio di persone.
5. **Divulgazione scientifica mediante scrittura di articoli in riviste di interesse generale:** aprile 2016, attività di divulgazione scientifica mediante pubblicazione dell'articolo: C. Aieta, G. Di Liberto, F. Gabas, R. Conte, and **M. Ceotto***, "Viaggio a Bordo di un Nanomotore guidato da Martin Karplus", *Nuova Energia* **2**, (2016).
6. **Lezioni divulgative presso le scuole superiori:** Lezione di introduzione alla chimica, alla meccanica quantistica, ai finanziamenti per la ricerca della Comunità Europea e illustrazione divulgativa del mio progetto ERC SEMICOMPLEX (10-5-2016 presso la Scuola Superiore Virgilio di Milano; 20-5-2016 e successivamente anche il 29-5-2017 presso la Scuola Sacro Cuore di Milano; 14-3-2022 presso il Liceo Scientifico Volta di Milano. Agli eventi hanno partecipato circa 160 persone in totale).
7. **Presentazione al "MeetMe Tonight":** 29-30 settembre 2017, evento organizzato dalla Comunità Europea in tutta Europa per avvicinare i comuni cittadini alla scienza e al contributo di essa alla società civile. Illustrazione della mia attività di ricerca insieme ad altri vincitori ERC milanesi presso il pubblico per festeggiare i 10 anni di fondazione dell'European Research Council (ERC).
8. **"A tu per tu con la ricerca - Speed Date":** 21-12-2017, "ERC Campioni della Ricerca e Professioni STEM" organizzato dal Museo Nazionale della Scienza e della Tecnologia Leonardo da Vinci di Milano. Scopo dell'incontro: avvicinare i ragazzi e le ragazze al mondo della ricerca d'eccellenza ma anche fare orientamento sulle carriere scientifiche attraverso il formato di "speed date". Attività di divulgazione e formazione per gli studenti delle scuole superiori organizzate dal museo milanese.
9. **Intervento su invito alla conferenza aperta al pubblico dal titolo "Ma siamo sicuri di sapere che cos'è la chimica?":** 17/5/2017 ore 18:00 presso l'Aula Magna del Liceo Virgilio. Intervento di divulgazione aperto a tutta la società sulla chimica e in particolare sul ruolo della chimica fisica nella scienza e nella società nell'ambito del progetto "Laboratori Avanzati" delle scuole superiori. Durante la manifestazione sono intervenuti anche altri colleghi chimici ma di ambito diverso.
10. **Intervento su invito all'adunanza annuale dell'Istituto Lombardo di Scienze e Lettere:** 24-06-2021, attività di divulgazione della chimica fisica attraverso la presentazione: "Qual è la più piccola goccia d'acqua?" (online causa restrizioni covid). Inoltre, ho sondato la possibilità di insegnare argomenti di chimica avanzati, come la meccanica quantistica e la chimica fisica molecolare, attraverso paralleli dalla vita comune, come illustrato in M. Ceotto, "Qual è la più piccola goccia d'acqua?", Istituto

Lombardo - Accademia di Scienze e Lettere - Rendiconti di Scienze, **155** (2021)
<https://doi.org/10.4081/scienze.2021.764>;

11. **Borsa di studio “Maria Francesca Gerini”**: (dal 2015) organizzazione dell'erogazione di 3 borse di studio per uno studente del primo, secondo e terzo anno della scuola secondaria di primo grado “Locatelli-Oriani”. L'organizzazione consiste nell'elaborazione di domande a contenuti STEM, la suddivisione delle domande nei 3 test di 3 livelli con la collaborazione delle insegnanti di Matematica e Scienze della suddetta scuola, la prova d'esame, la correzione e infine l'elargizione delle borse ai tre vincitori con una cerimonia presso la suddetta scuola. Lo scopo della borsa di studio è quello di avvicinare tutti gli studenti che partecipano al test ai contenuti STEM.
12. **“La Chimica è ... il mondo intorno a noi”**: (Giugno 2012) Appuntamenti con la Chimica 2012-2013”, presso UNIMI (Lezione Frontale sulla Simmetria in Chimica presso l'Aula Simonetta: 2h)

Data

05/04/2023

Luogo

Milano