

# Curriculum dettagliato dell'attività scientifica e didattica



**Marco Campetella**

Assegnista Seal of Excellence

Dipartimento di Chimica

Scuola Normale Superiore

## Sommario

1. ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE CONSEGUITA PER IL RUOLO DI PROFESSORE DI SECONDA FASCIA .....	pag. 2
2. TITOLI DI STUDIO UNIVERSITARIO .....	pag. 2
3. ATTIVITA' DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA E ALL'ESTERO .....	pag. 3
4. ATTIVITA' DI RELATORE E CO-RELATORE DI TESI DI LAUREA E DOTTORATO .....	pag. 3
5. ATTIVITA' DI FORMAZIONE E RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI E STRANIERI .....	pag. 4
6. REALIZZAZIONE DI ATTIVITA' PROGETTUALE .....	pag. 5
7. PARTECIPAZIONE ALLE ATTIVITÀ DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI .....	pag. 6
8. RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI .....	pag. 8
9. ELENCO COMPLETO DELLE PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE .....	pag. 9
10. ALTRI TITOLI .....	pag. 12
11. INTERESSI SCIENTIFICI E ATTIVITA' DI RICERCA .....	pag. 13
12. INFORMAZIONI GENERALI.....	pag. 14

## 1. ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE CONSEGUITA PER IL RUOLO DI PROFESSORE DI SECONDA FASCIA

#	Validità	Settore
1	31/01/2022 31/01/2033	03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE
2	31/01/2022 31/01/2033	03/B1 - FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI
3	31/01/2022 31/01/2033	02/B2 - FISICA TEORICA DELLA MATERIA

## 2. TITOLI DI STUDIO UNIVERSITARIO

#	TITOLO DI STUDIO	DATA DI CONSEGUIMENTO	TITOLO DELLA TESI	VOTAZIONE
1	MASTER DI II LIVELLO IN MACHINE LEARNING	27/01/22	Traffic Sign Recognition by means Neural Network	109/110
2	DOTTORATO IN SCIENZE DEI MATERIALI (XXVII CICLO)	15/12/14	Structural studies of ionic liquids by means of X-ray and theoretical methods <u>Relatore:</u> Prof. Ruggero Caminiti	-
3	LAUREA MAGISTRALE IN FISICA DELLA MATERIA CONDENSATA	21/12/11	Glue function in superconductor Cuprate: no biased approach <u>Relatore:</u> Prof. Marco Grilli	110/110
4	LAUREA TRIENNALE IN FISICA	23/09/09	Materiali a indice di rifrazione negativo <u>Relatore:</u> Prof. Stefano Lupi	110/110
5	LAUREA MAGISTRALE IN CHIMICA COMPUTAZIONALE	27/10/06	Electron-molecules scattering: a theoretical approach <u>Relatore:</u> Prof. F. A. Gianturco	110/110

6	LAUREA TRIENNALE IN CHIMICA	21/09/04	Low-Electron scattering in biomolecule <u>Relatore:</u> Prof. F.A. Gianturco	110/110 e lode
---	--------------------------------	----------	--	-------------------

### 3. ATTIVITA' DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

CORSI ISTITUZIONALI presso il Dipartimento di Scienze Naturali e il Dipartimento di Ingegneria dell'Università di Roma "La Sapienza" (240 ore / 30 CFU)

#	ANNO ACCADEMICO	NOME DEL CORSO	CORSO DI STUDI	ORE	CFU
1	2013	Chimica	Scienze Naturali	48	6
2	2013	Fisica	Scienze Naturali	48	6
3	2013	Chimica	Ingegneria Chimica	48	6
4	2014	Chimica	Scienze Naturali	48	6
5	2014	Fisica	Scienze Naturali	48	6

ATTIVITA' DIDATTICA PRESSO SCUOLE DI DOTTORATO (20 ore / 2 CFU) dell'Università "Chimie ParisTech" di Parigi

#	ANNO ACCADEMICO	NOME DEL CORSO	CORSO DI STUDI	ORE	CFU
1	2018	Principles of Quantum Chemistry	Chimica	20	2

### 4. ATTIVITA' DI RELATORE E CO-RELATORE DI TESI DI LAUREA E DOTTORATO

#### Relatore

#	DATA LAUREA	CANDIDATO	TITOLO DELLA TESI	CORSO DI LAUREA / DOTTORATO
1	23/11/15	Francesco Cappelluti	Geometry optimization of Multicenter Transition Metal clusters through Extended Broken Symmetry approach	Laurea Magistrale in Chimica Computazionale

## co-Relatore

#	DATA LAUREA	CANDIDATO	TITOLO DELLA TESI	CORSO DI LAUREA / DOTTORATO
1	in corso	Stefano Villani	Giant effective charges in substituted conjugated polymers	Dottorato in Fisica della Materia Condensata
2	20/02/19	Federica Maschietto	A theoretical approach to density-based molecular photochemistry for the study of remarkable properties relating to molecular excited states	Dottorato in Chimica Teorica Materia Condensata

## 5. ATTIVITA' DI FORMAZIONE E RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI E STRANIERI

#	PERIODO	QUALIFICA	SEDE	ARGOMENTO DI RICERCA	PROGETTO E REFERENTE	MESI
1	Dal 01/04/2024 al in corso	Assegnista di ricerca (L. 240/2010)	SNS di Pisa	Studio teorico di proprietà elettroniche e strutturali di molecole organiche	<u>Progetto</u> : FARE (Ricerca in Italia) <u>Referente</u> : Prof. Chiara Cappelli	24
2	Dal 01/12/2021 al in corso	Assegnista di ricerca "Seal of Excellence"	Dipartimento di Chimica Università di Siena	Studio delle proprietà elettroniche e strutturali di sistemi TADF	<u>Progetto</u> : Seal of Excellence <u>Referente</u> : Dr. Marco Campetella	18
3	Dal 01/09/2020 al 30/11/2021	Assegnista di ricerca (L. 240/2010)	Istituto SPIN del CNR	Studio delle proprietà elettroniche e fononiche di sistemi 1D	<u>Progetto</u> : SPIN AR 004/2020 <u>Referente</u> : Dr. Paolo Barone	15
4	Dal 01/09/2018 al 31/08/2020	Assegnista di ricerca	Università "La Sorbonne" di Parigi	Studio delle proprietà elettroniche e fononiche di sistemi 2D	<u>Progetto</u> : Graphene Flagship Core 2 Grant No. 785219 <u>Referente</u> : Prof. Matteo Calandra	24
5	Dal 01/09/2016 al 31/08/2018	Assegnista di ricerca	Chimie ParisTech di Parigi	Sviluppo di indici per lo studio di transizioni "Charge Transfer"	<u>Progetto</u> : ERC STRIGES <u>Referente</u> : Dr. Ilaria Ciofini	24

6	Dal 15/06/2015 al 14/06/2016	Assegnista di ricerca (L. 240/2010)	Dipartimento di Chimica dell'Università di Pisa	Simulazioni di Proprietà eccitoniche di Sistemi "Light Harvesting"	<u>Progetto:</u> ERC ENLIGHT <u>Referente:</u> Prof. Benedetta Mennucci	12
7	Dal 01/03/2013 al 01/07/2013	PhD Visiting	Dipartimento di Chimica dell'Università di Bonn	Simulazioni <i>ab initio</i> di Liquidi Ionici	<u>Visiting PhD Student sotto</u> <u>la</u> <u>supervisione della</u> <u>Prof.ssa Barbara Kirchner</u>	4
8	Dal 01/11/2011 al 31/10/2014	Dottorando in Scienza dei Materiali (XXVII Ciclo)	Dipartimento di Chimica dell'Università "La Sapienza" di Roma	Studio di proprietà strutturali di Liquidi Ionici di Liquidi Ionici	<u>Responsabile Scientifico:</u> Prof. Ruggero Caminiti	36
9	Dal 01/02/2008 al 01/07/2009	Borsa di Studio	CINECA (sede di Roma)	Simulazioni atomistiche di composti azotati	<u>Progetto:</u> Borsa di Studio <u>Referente:</u> Dr. Andrea <u>Pieretti</u>	18

## ALTRA ATTIVITA' DI FORMAZIONE

#	PERIODO	CORSO / SCUOLA	LUOGO
1	lug-2021	TREX e-School on Quantum Monte Carlo with TurboRVB	Trieste
2	gen-2020	Computational School on Electronic Excitations in Novel Materials Using the Computational School on Electronic Excitations in Novel Materials Using the Yambo Code	Trieste
3	set-2017	European Summer School in Quantum Chemistry	Torre Normanna (Italia)
4	ago-2015	CECAM 4th CP2K Tutorial	Losanna
5	feb-2013	School in Introduction to HPC: parallel computing, CINECA	Roma
6	giu-2012	School in Introduction to HPC: high performance computing, CASPUR	Roma
7	mag-2012	CECAM Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) tutorial: understanding condensed matter and molecular physics	Losanna

## 6. REALIZZAZIONE DI ATTIVITA' PROGETTUALE

### Responsabilità di progetti di ricerca

#	TIPOLOGIA	DURATA	RESPONSABILE	RUOLO
1	Seal Of Excellence	2021-2023	Dr. Marco Campetella	PI del Progetto
2	ISCRA C	2020-2021	Dr. Marco Campetella	PI del Progetto

### Partecipazione a progetti di ricerca

#	TIPOLOGIA	DURATA	RESPONSABILE	RUOLO
3	FARE (Ricerca in Italia)	2024-2026	Prof. Chiara Cappelli	Partecipazione alle attività di ricerca
4	SPIN AR 004/2020	2020-2021	Dr. Paolo Barone	Partecipazione alle attività di ricerca
5	Graphene Flagship Core 2 Grant No. 785219	2018-2020	Prof. Matteo Calandra	Partecipazione alle attività di ricerca
6	ERC STRIGES	2016-2018	Dr.ssa Ilaria Ciofini	Partecipazione alle attività di ricerca
7	ERC ENLIGHT	2011-2016	Prof.ssa Benedetta Mennucci	Partecipazione alle attività di ricerca
8	Borsa di Dottorato	2011-2014	Prof. Ruggero Caminiti	Partecipazione alle attività di ricerca
9	Borsa di Studio	2008-2009	Dr. Andrea Pieretti	Partecipazione alle attività di ricerca

### Presentazione proposte progettuali

#	TIPOLOGIA	TITOLO PROGETTO	RUOLO	ESITO
1	Seal of Excellence	Electronic Properties of TADFs systems	PI	Progetto Finanziato
2	Marie Curie Fellowship	Electronic Properties of TADFs systems	PI	Progetto non finanziato con ottenimento del Seal of Excellence (punteggio 91.6 / 100)
3	Newton Fellowship	Modelling the charge transport properties of semiconducting polymers from their chemical formula	PI	Progetto non finanziato ma valutato positivamente

## 7. PARTECIPAZIONE ALLE ATTIVITÀ DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI

PERIODO	Gruppo di ricerca e collaborazioni	PROGETTI (numerazione sez. 6)	PUBBLICAZIONI (numerazione sez. 9)
Da Aprile 2024 ad oggi	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo della Prof. Chiara Cappelli <b>Collaborazioni:</b> Dr. Tommaso Giovannini (SNS)	3	45
Da Dicembre 2021 ad oggi	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo del Prof. Massimo Olivucci <b>Collaborazioni:</b> Dr. Daniele Padula (Università di Siena) Dr. Giacomo Prampolini (CNR di Pisa)	1	26
Da Settembre 2020 ad oggi	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo del Dr. Paolo Barone e del Prof. Francesco Mauri <b>Collaborazioni:</b> Dr. Lorenzo Monacelli (ETH di Zurigo) Prof. Matteo Calandra (Università di Trento) Dr. Stefano Villani (Università di Roma)	4	1,12
Da Settembre 2018 ad Agosto 2020	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo del Prof. Matteo Calandra <b>Collaborazioni:</b> Dr. Cesare Tresca (CNR) Dr. Jianqiang Sky Zhou (Sorbonne di Parigi)	5	2, 29
Da Settembre 2016 ad oggi	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo della Dr.ssa Ilaria Ciofini e del Prof. Carlo Adamo <b>Collaborazioni:</b> Dr. Juan Sanz Garcia (Università di Tolosa) Dr.ssa Federica Maschietto (Berkley) Dr.ssa Anna Perfetto (Sorbonne di Parigi)	6	3, 5, 6, 16, 27, 30, 32-35
Da Giugno 2015 ad oggi	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo della Prof.ssa Benedetta Mennucci <b>Collaborazioni:</b> Dr. Lorenzo Cupellini (Università di Pisa) Dr. Stefano Caprasecca (Università di Pisa) Dr. Giacomo Prampolini (CNR) Dr.ssa Ingrid Prandi (Università di Pisa)	7	14,36,38,39

Da Ottobre 2011 ad oggi	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo del Prof. Ruggero Caminiti <b>Collaborazioni:</b> Dr. Lorenzo Gontrani (Università Tor Vergata)	8	4,7,8,9,10,11,13,15,17- 25,27,31,37,40-43
	Prof. Enrico Bodo (Univesità La Sapienza) Prof. Fabio Ramondo (Università La Sapienza) Prof. Leonardo Guidoni (Università Aquila) Dr. Luigi Bencivenni (Università La Sapienza) Prof. Marco Grilli (Università La Sapienza)		
Da Febbraio 2008 a Luglio 2009	Partecipazione alle attività di ricerca del gruppo del Dr. Andrea Pieretti <b>Collaborazioni:</b> Dr. Lorenzo Gontrani (Università Tor Vergata) Prof. Nico Sanna (Università della Toscana) Dr. Giordano Mancini (Università di Pisa) Dr.ssa Ingrid Prandi (Università di Pisa)	9	44

## 8. RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

### Comunicazioni orali

#	CONGRESSO	LUOGO E DATA	AUTORI E TITOLO
1	ACS	Boston, Aprile 2018	M. Campetella, A. Perfetto, I. Ciofini <i>"Tuned quantification of particle-hole distance in charge-transfer excitations: A revised version of the DCT index"</i>
2	TheoBio	San Sebastian, Giugno 2017	M. Campetella, F. Maschietto, I. Ciofini, C. Adamo <i>"Charge Transfer Excitations in TDDFT: A Ghost-Hunter Index"</i>
3	CMS	Warwick, Marzo 2017	M. Campetella, F. Maschietto, I. Ciofini, C. Adamo <i>"Ghost states in TDDFT : a reliable descriptor for their detection"</i>
4	ESCS	Parigi, Novembre 2016	M. Campetella, L. Cupellini, S. Jurinovic, C. A. Guido, S. Caprasecca, Benedetta Mennucci <i>"Excitonic Approach in Complex Light Harvesting Systems"</i>



5	ACS	San Diego, Aprile 2016	M. Campetella, L. Cupellini, S. Jurinovic, C. A. Guido, S. Caprasecca, Benedetta Mennucci "Simulation of the electronic spectra of LH <sub>2</sub> complex of bacteria through a polarizable QM/MM approach"
---	-----	------------------------	---

### Comunicazioni poster

#	CONGRESSO	LUOGO E DATA	AUTORI E TITOLO
1	Congresso Nazionale della società Chimica Italiana	Roma, Dicembre 2015	M. Campetella, L. Cupellini, S. Jurinovic, C. A. Guido, S. Caprasecca, Benedetta Mennucci "Simulation of the electronic spectra of LH <sub>2</sub> complex of bacteria through a polarizable QM/MM approach"
2	Winter Modeling	Modena, Marzo 2013	M. Campetella, L. Gontrani, R. Caminiti, L. Bencivenni "Static and Dynamical Properties of Oxirane : an Experimental and Theoretical Approach"

## 9. ELENCO COMPLETO DELLE PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

Marco Campetella è autore di 45 pubblicazioni scientifiche, di cui 12 come corresponding author, 13 come primo autore e 20 come altro contributo, come di seguito dettagliato.

Indicatori relativi a tutta la produzione scientifica (al 5 luglio 2024 fonte scopus):

Totale Citazioni: 970

H-index : 19

### CORRESPONDING AUTHOR (12 pubblicazioni)

1. M. Campetella, M. Calandra, *Polar magnetic metallic state in few-layer BiFeO<sub>3</sub>*, Physical Review B, vol. 104, p. 174111, DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.174111> (2021).
2. M. Campetella, N. M. Nguyen, J. Baima, L. Maschio, F. Mauri, M. Calandra, *Hybrid- functional electronic structure of multilayer graphene*, Physical Review B, vol. 101, p. 165437, DOI: 10.1103/PhysRevB.101.165437 (2020)
3. M. Campetella, J. S. Garcia, *Following the Evolution of Excited States along Photochemical Reaction Pathways*, The Journal of Computational Chemistry, Vol. 41, p. 1156-1164, DOI: 10.1002/jcc.26162 (2020)

4. M. Campetella, F. Cappelluti, L. Gontrani, *Medium Range Interactions Evidences in Compounds with Aliphatic Lateral Chain : 1-Pentanoic Acid, 1-Pentanol and Pentylammonium Nitrate as Test Cases*, Chemical Physics Letters, vol. 734, p. 136738, DOI: 10.1016/j.cplett.2019.136738 (2019)
5. J. S. Garcia, M Boggio-Pasqua, I. Ciofini, M. Campetella, *Excited State Tracking During the Relaxation of Coordination Compounds*, The Journal of Computational Chemistry, vol. 40, 1420–1428, DOI: 10.1002/jcc.25800 (2019)
6. M. Campetella, A. Perfetto, I. Ciofini, *Quantifying partial hole-particle distance at the excited state: A revised version of the DCT index*, Chemical Physics Letters, vol. 714, p. 81-86, DOI: 10.1016/j.cplett.2018.10.060 (2019)
7. M. Campetella, A. Mariani, C. Sadun, B. Wu, E.W. Castner Jr, L. Gontrani, *Structure and dynamics of propylammonium nitrate-acetonitrile mixtures: An intricate multi-scale system probed with experimental and theoretical techniques*, The Journal of Chemical Physics, vol. 148, p. 134507, DOI: 10.1063/1.5021868 (2018)
8. L. Gontrani, R. Caminiti, U. Salma, M. Campetella, *A structural and theoretical study of the alkylammonium nitrates forefather: Liquid methylammonium nitrate*, Chemical Physics Letters, vol. 684, p. 304-309, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.07.017 (2017)
9. L. Gontrani, F. Leonelli, M. Campetella, *An X-Ray and Computational Study of Liquid Pentylammonium Nitrate*, Chemical Physics Letters, vol. 687, p. 38-43, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.08.068 (2017)
10. M. Campetella, M. Macchiagodena, L. Gontrani, B. Kirchner, *Effect of alkyl chain length in protic ionic liquids: an AIMD perspective*, Molecular Physics, vol. 115, p. 1582-1589, DOI: 10.1080/00268976.2017.1308027 (2017)
11. L. Gontrani, E. Scarpellini, R. Caminiti, M. Campetella, *Bio ionic liquids and water mixtures: a structural study*, RSC Advances, vol. 7, p.19338-19344, DOI: 10.1039/C6RA28545G (2017)
12. M. Campetella, G. Marini, J. S. Zhou, M. Calandra, *Electron-Phonon driven charge density wave in CuTe*, Physical Review B, vol. 108, p. 024304, DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.024304> (2023)

## PRIMO AUTORE (13 pubblicazioni)

13. M. Campetella, F. Cappelluti, C. Fasolato, D. Conte, O. Palumbo, A. Paolone, M. Carbone, P. Postorino, L. Gontrani, *Physical-chemical studies on putrescine (butane-1,4-diamine) and its solutions: Experimental and computational investigations*, Journal of Molecular Liquids, pag. 114568, DOI: 10.1016/j.molliq.2020.114568 (2021)
14. M. Campetella, N. De Mitri, G. Prampolini, *Automated parameterization of quantum-mechanically derived force-fields including explicit sigma holes: A pathway to energetic and structural features of halogen bonds in gas and condensed phase*, Journal of Chemical Physics, vol. 53, pag. 044106, DOI: 10.1063/5.0014280 (2020)
15. M. Campetella, A. Le Donne, M. Daniele, L. Gontrani, S. Lupi, E. Bodo, F. Leonelli, *Hydrogen bonding features in cholinium-based protic ionic liquids from molecular dynamics simulations*, The Journal of Physical Chemistry B, vol. 122, p. 2635-2645, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12455 (2018)
16. M. Campetella, F. Maschietto, M.J. Frisch, G. Scalmani, I. Ciofini, C. Adamo, *Charge transfer excitations in TDDFT: A ghost-hunter index*, Journal of Computational Chemistry, vol. 38, p. 2151-2156, DOI: 10.1002/jcc.24862 (2017)
17. M. Campetella, M. Montagna, L. Gontrani, E. Scarpellini, E. Bodo, *Unexpected proton mobility in the bulk phase of cholinium-based ionic liquids: new insights from theoretical calculations*, Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 19, p. 11869-11880, DOI: 10.1039/C7CP01050H (2017)
18. M. Campetella, D. C. Martino, E. Scarpellini, L. Gontrani, *Low-q peak in x-ray patterns of choline-phenylalanine and-homophenylalanine: A combined effect of chain and stacking*, Chemical Physics Letters, vol. 660, p. 99-101, DOI: 10.1016/j.cplett.2016.08.015 (2016)

19. M. Campetella, D. Bovi, R. Caminiti, L. Guidoni, L. Bencivenni, L. Gontrani, *Structural and vibrational study of 2-methoxyethylammonium nitrate (2-omeean): Interpretation of experimental results with ab initio molecular dynamics*, The Journal of Chemical Physics, vol. 145, p. 024507, DOI: 10.1063/1.4956459 (2016)
20. M. Campetella, L. Bencivenni, R. Caminiti, C. Zazza, S. Di Trapani, A. Martino, L. Gontrani, *Chloromethyl-oxirane and chloromethyl-thiirane in liquid phase: A joint experimental and quantum chemical study*, Chemical Physics, vol. 473, p. 24-31, DOI:10.1016/j.chemphys.2016.03.027 (2016)
21. M. Campetella, E. Bodo, M. Montagna, S. De Santis, L. Gontrani, *Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. ab initio simulations of their condensed phases*, The Journal of Chemical Physics vol. 144, p. 104504, DOI: 10.1063/1.4943197 (2016)
22. M. Campetella, E. Bodo, R. Caminiti, A. Martino, F. D'Apuzzo, S. Lupi, L. Gontrani, *Interaction and dynamics of ionic liquids based on choline and amino acid anions*, The Journal of Chemical Physics, vol. 142, p. 234502, DOI: 10.1063/1.4922442 (2015)
23. M. Campetella, S. De Santis, R. Caminiti, P. Ballirano, C. Sadun, L. Tanzi, L. Gontrani, *Is a medium-range order pre-peak possible for ionic liquids without an aliphatic chain?*, RSC Advances, vol. 5, p. 50938-50941, DOI: 10.1039/C5RA07567J (2015)
24. M. Campetella, L. Gontrani, F. Leonelli, L. Bencivenni, R. Caminiti, *Two different models to predict ionic-liquid diffraction patterns: Fixed-charge versus polarizable potentials*, ChemPhysChem, vol. 16, p. 197-203, DOI: 10.1002/cphc.201402577 (2015)
25. M. Campetella, L. Gontrani, E. Bodo, F. Ceccacci, F. C. Marincola, R. Caminiti, *Conformational isomerisms and nano-aggregation in substituted alkylammonium nitrates ionic liquids: An x-ray and computational study of 2-methoxyethylammonium nitrate*, The Journal of Chemical Physics, vol. 138, p. 184506, DOI: 10.1063/1.4803799 (2013)

## ALTRO CONTRIBUTO (20 pubblicazioni)

26. G. Prampolini, M. Campetella, A. Ferretti, *Solvent effects on catechol's binding affinity: investigating the role of the intra-molecular hydrogen bond through a computational multi-level approach*, PCCP, DOI: 10.1039/D2CP04500A (2022).
27. F. Maschietto, M. Campetella, J. Sanz García, C. Adamo, I. Ciofini, *Chasing unphysical TD- DFT excited states in transition metal complexes with a simple diagnostic tool*, vol. 154, p. 204102, DOI: doi.org/10.1063/5.0050680 (2021)
28. O. Palumbo, A. Paolone, M. Campetella, F. Ramondo, F. Cappelluti, L. Gontrani, *New insights into chloromethyl-oxirane and chloromethyl-thiirane in liquid and solid phase from low-temperature infrared spectroscopy and ab initio modeling*, Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, vol. 247, pag. 119061, DOI: 10.1016/j.saa.2020.119061 (2021)
29. Raphael T Leriche, Alexandra Palacio-Morales, Marco Campetella, Cesare Tresca, Shunsuke Sasaki, Christophe Brun, François Debontridder, Pascal David, Imad Arfaoui, Ondrej Sofranko, Tomas Samuely, Geoffroy Kremer, Claude Monney, Thomas Jaouen, Laurent Cario, Matteo Calandra, Tristan Cren, *Misfit Layer Compounds: A Platform for Heavily Doped 2D Transition Metal Dichalcogenides*, Advanced Functional Materials, pag. 200776, DOI:10.1002/adfm.202007706 (2021)
30. L. Huet, A. Perfetto, F. Muniz-Miranda, M. Campetella, C. Adamo, and I. Ciofini, *A general density-based index to analyze charge transfer phenomena: from models to butterfly molecules*, Journal of Chemical Theory and Computation, vol. 16, p. 4543, DOI: 10.1021/acs.jctc.0c00296 (2020)
31. F. Ramondo, L. Gontrani, M. Campetella, *Coupled hydroxyl and ether functionalisation in EAN derivatives: The effect of hydrogen bond donor/acceptor groups on the structural heterogeneity studied with X-ray diffractions and fixed charge polarizable simulations*, Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 21, p. 11464-11475, DOI: 10.1039/C9CP00571D (2019)

32. J. S. Garcia, E. Bremond, M. Campetella, I. Ciofini, C. Adamo, *Small Basis Set Allowing the Recovery of Dispersion Interactions with Double-Hybrid Functionals*, Journal of Chemical Theory and Computation, vol. 15, p. 2944-2953, DOI: 10.1021/acs.jctc.8b01203 (2019)
33. F. Maschietto, J. Sanz García, M. Campetella, I. Ciofini, *Using density based indexes to characterize excited states evolution*, The Journal of Computational Chemistry, vol. 40, p. 650-656, DOI: doi.org/10.1002/jcc.25750 (2018)
34. F. Maschietto, M. Campetella, M.J. Frisch, G. Scalmani, C. Adamo, I. Ciofini, *How are the charge transfer descriptors affected by the quality of the underpinning electronic density?*, Journal of Computational Chemistry, vol. 39, p. 735-742, DOI: 10.1002/jcc.25144 (2018)
35. J. Sanz García, F. Maschietto, M. Campetella, I. Ciofini, *Using Density Based Indexes and Wave Function Methods for the Description of Excited States: Excited State Proton Transfer Reactions as a Test Case*, The Journal of Physical Chemistry A, vol. 122, p. 375-382, DOI: 10.1021/acs.jpca.7b10033 (2018)
36. O. Andreussi, I.G. Prandi, M. Campetella, G. Prampolini, B. Mennucci, *Classical Force Fields Tailored for QM Applications: Is It Really a Feasible Strategy?*, Journal of Chemical Theory and Computation, vol. 13, p. 4636-4648, DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00777 (2017)
37. A. Mariani, M. Campetella, C. Fasolato, M. Daniele, F. Capitani, L. Bencivenni, P. Postorino, S. Lupi, R. Caminiti, L. Gontrani, *A joint experimental and computational study on ethylammonium nitrate-ethylene glycol 1: 1 mixture. Structural, kinetic, dynamic and spectroscopic properties*, Journal of Molecular Liquids, vol. 226, p. 2-8, DOI: 10.1016/j.molliq.2016.08.043 (2017)
38. L. Cupellini, S. Jurinovich, M. Campetella, S. Caprasecca, C. A. Guido, S. M. Kelly, A. T. Gardiner, R. Cogdell, B. Mennucci, *An ab initio description of the excitonic properties of LH2 and their temperature dependence*, The Journal of Physical Chemistry B, vol. 120, p. 11348-11359, DOI: 10.1021/acs.jpcb.6b06585 (2016)
39. G. Prampolini, M. Campetella, N. De Mitri, P. R. Livotto, I. Cacelli, *Systematic and automated development of quantum mechanically derived force fields: the challenging case of halogenated hydrocarbons*, Journal of Chemical Theory and Computation, vol. 12, p. 5525-5540, DOI: 10.1021/acs.jctc.6b00705 (2016)
40. L. Fanfarillo, M. Mori, M. Campetella, M. Grilli, S. Caprara, *Glue function of optimally and overdoped cuprates from inversion of the raman spectra*, Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 28, p. 065701, DOI: 10.1088/0953-8984/28/6/065701 (2016)
41. A. Mariani, R. Caminiti, M. Campetella, L. Gontrani, *Pressure-induced mesoscopic disorder in protic ionic liquids: first computational study*, Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 18, p. 2297-2302, DOI: 10.1039/C5CP06800B (2015)
42. L. Tanzi, F. Ramondo, R. Caminiti, M. Campetella, A. Di Luca, L. Gontrani, *Structural studies on choline-carboxylate bio-ionic liquids by x-ray scattering and molecular dynamics*, The Journal of Chemical Physics, vol. 143, p. 09B614\_1, DOI: 10.1063/1.4931031 (2015)
43. S. De Santis, G. Masci, F. Casciotta, R. Caminiti, E. Scarpellini, M. Campetella, L. Gontrani, *Cholinium-amino acid based ionic liquids: a new method of synthesis and physico- chemical characterization*, Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 17, p. 20687-20698, DOI: 10.1039/C5CP01612F (2015)
44. F. Ramondo, L. Tanzi, M. Campetella, L. Gontrani, G. Mancini, A. Pieretti, C. Sadun, *Hydration of diazoles in water solution: pyrazole. a theoretical and x-ray diffraction study*, Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 11, p. 9431-9439, DOI: 10.1039/B909388E (2009)
45. S. Villani, M. Campetella, P. Barone, F. Mauri, *Giant piezoelectricity driven by Thouless pump in conjugated polymers*, NPJ Computational Materials 10, 81, DOI: https://doi.org/10.1038/s41524-024-01269-8 (2024)

## 10. ALTRI TITOLI

- ATTIVITA' DI REVIEWER

Marco Campetella svolge regolarmente attività di reviewer per le seguenti riviste: *Journal*

*of Chemical Theory and Computation, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Physical Chemistry Chemical Physics, Theoretical Chemistry, The European Physical Journal Plus, International Journal of Quantum Chemistry, Molecular Physics, Phys. Rev. B*

- **ATTIVITA' DI EDITOR**  
Marco Campetella ha svolto l'attività di editor per la rivista: *Symmetry*
- **SAS CERTIFIED SPECIALIST**  
Marco Campetella ha ottenuto il certificato SAS nell'ambito del Machine Learning
- **CONOSCENZA LINGUE STRANIERE**  
Italiano (madrelingua), Inglese (fluente), Francese (base)

## 11. INTERESSI E ATTIVITA' DI RICERCA

Il Dr. Marco Campetella svolge la sua attività di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Siena dal dicembre 2021, precedentemente ha svolto la sua attività di ricerca presso il CNR di Tor Vergata (Roma), l'Università Sorbonne di Parigi, lo Chimie ParisTech di Parigi, il dipartimento di Chimica dell'Università di Pisa e il dipartimento di Chimica dell'Università di Roma la "La Sapienza".

L'attività di ricerca del Dr. Campetella concerne il calcolo e la modellizzazione di proprietà elettroniche e strutturali, per la progettazione e caratterizzazione sia di materiali organici (e.g. liquidi ionici biologici, sistemi light harvesting), sia di materiali inorganici (e.g. materiali periodici 3D-1D, complessi di Rutenio, molecole foto-attive nell'ambito dei materiali funzionalizzati).

Per la caratterizzazione delle proprietà strutturali il Dr. Campetella ha negli anni sia utilizzato metodologie esistenti, basate su un approccio combinato di tecniche sperimentali e teorico-computazionali, che contribuito all'implementazione di procedure di calcolo più innovative. Le tecniche sperimentali principalmente usate in quest'ambito dal Dr. Campetella sono la spettroscopia a raggi-X e quella IR, che danno accesso a utili informazioni strutturali, a livello molecolare e/o atomico quando combinate con metodi computazionali. In questo frangente, il Dr. Campetella ha acquisito una notevole esperienza nell'utilizzo di metodi come la dinamica molecolare classica e *ab initio*. Sempre nell'ambito delle proprietà strutturali, il Dr. Campetella si è recentemente specializzato in nuove procedure computazionali, basate sul il calcolo a livello quantistico dei modi normali (molecole) o dei fononi (materiali periodici), curandone l'applicazione allo studio di instabilità in alcuni sistemi di interesse applicativo.

Nello studio delle proprietà elettroniche, il Dr. Campetella generalmente si è avvalso di metodi computazionali implementati in diversi pacchetti software distribuiti, eseguendo calcoli sia basati sulla teoria del funzionale densità (DFT) che sulla funzione d'onda, a livello post-HF. In mancanza di software disponibile per il calcolo di proprietà elettroniche specifiche, il Dr. Campetella ha sviluppato i propri strumenti computazionali, come ad esempio un codice per identificare nuovi indici in grado di definire la distanza buca/particella in transizioni di tipo charge-transfer, oppure programmi per calcolare il numero di portatori di carica al variare della temperatura in sistemi metallici o "half-metal".

Di seguito viene riportato un elenco delle varie tipologie di tecniche computazionali utilizzate:

1. Tecniche di dinamica molecolare (MD) sia classica (GROMACS, AMBER) che *ab initio* (CP2K, CPMD) utilizzate per descrivere le proprietà strutturali di sistemi complessi anche di grandi dimensioni.
2. Connesso al precedente, tecniche di analisi delle traiettorie MD, in termini ad esempio di  $g(r)$ , *power spectrum* o *free energy curves* (queste ultime calcolate con tecniche quali Umbrella Sampling e Thermodynamic Integration).
3. Sviluppo di campi di forza classici (FF) da impiegare in simulazioni di grandi dimensioni, ottimizzati su calcoli quantistici in sistemi modello (JOYCE, PICKY). Sviluppo, tramite queste tecniche, di FF sia intra- che inter-molecolari, costruiti *ad hoc* per ogni molecola studiata con delle performance, in termine di confronto con dati sperimentali, molto superiore rispetto ai FF standard, quali ad esempio OPLS e GAFF.
4. Calcoli quantistici ottenuti con diversi livelli di teoria, da DFT a post-HF, su sistemi molecolari (GAUSSIAN, ORCA). Tali calcoli sono stati effettuati sia in vuoto, sia tenendo in considerazione esplicitamente degli effetti dispersivi e degli effetti ambientali derivanti da calcoli in matrice, al fine di descrivere struttura, energetica, proprietà elettroniche e reattività dei sistemi studiati.
5. Calcoli quantistici a livello DFT e GW su sistemi periodici (CRYSTAL, QE, YAMBO). Suddetti calcoli sono stati effettuati sia su sistemi metallici che sistemi isolanti per descriverne le proprietà ottiche (numero di portatori, gap ottici) e strutturali (instabilità, transizioni ferro-elettriche).
6. Scrittura di codice Fortran/Python per il calcolo di quantità non standard per la caratterizzazione di nuovi materiali.

## 12. INFORMAZIONI GENERALI

Nome Cognome : Marco Campetella

Data di Nascita : 26/10/1982

Luogo di Nascita : Roma

Indirizzo di Residenza : Via Tempio degli Arvali 41, 00148, Roma

Email : marco.campetella82@gmail.com

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali presenti nel cv ai sensi del Decreto Legislativo 30 giugno 2003, n. 196 "Codice in materia di protezione dei dati personali" e dell'art. 13 del GDPR (Regolamento UE 2016/679)

Il sottoscritto Marco Campetella, ai sensi degli artt. 46 e 47 del D.P.R. 445/2000 e consapevole che le dichiarazioni mendaci sono punite ai sensi del codice penale e delle leggi speciali in materia, secondo le disposizioni richiamate dall'art. 76 del D.P.R. 445/2000, dichiara che le informazioni contenute nel presente curriculum vitae sono corrispondenti al vero.

*Roma, 14-07-2024*