

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n.1 posto di Ricercatore a tempo determinato in tenure track (RTT), riservata ai sensi dell'art.14 comma 6-septiesdecies del decreto legge 30 aprile 2022, n. 36 convertito con modificazioni, dalla Legge 29 giugno 2022, n. 79 per il settore concorsuale 03/A2, settore scientifico-disciplinare CHIM/02 (CHEM-02/A) - CHIMICA FISICA, presso il Dipartimento di CHIMICA, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 49 del 18.06.2024 Codice concorso: 5573

Giovanni Macetti

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	MACETTI
NOME	GIOVANNI
DATA DI NASCITA	

TITOLI**POSIZIONE LAVORATIVA ATTUALE**

Assegnista di Ricerca
Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano
Dal 01 novembre 2022 ad oggi

TITOLO DI STUDIO

- 2015: Laurea Magistrale in Scienze Chimiche
Facoltà di Scienze e Tecnologie, Università degli Studi di Milano
Titolo della tesi: *Experimental and Theoretical Study of the Mechanism of Action of the Antimalarial Drug Chloroquine.*
Relatori: Prof. L. Lo Presti (Unimi), Dr. Carlo Gatti
Voto: 110/110 e lode
Data conseguimento: 06 ottobre 2015

-2013: Laurea Triennale in Chimica
Facoltà di Scienze e Tecnologie, Università degli Studi di Milano
Voto: 110/110 e Lode
Titolo: *Produzione di idrogeno per photosplitting dell'acqua su nanotubi di TiO₂.*
Relatori: Prof. G. Chiarello, Prof.ssa E. Selli
Data conseguimento: 16 ottobre 2013

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

- 2019: Dottorato di Ricerca in Chimica
Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano
Titolo della tesi: *Topological Descriptors Enabling Novel Dissection of Electron Position and Spin Properties in Complex Molecular Systems*
Tutor: Prof. L. Lo Presti (Unimi), Dr. C. Gatti (CNR)
Data conseguimento: 29 gennaio 2019

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNINI DI RICERCA O EQUIVALENTI

- 11/2022 - ad oggi: assegnista di ricerca

Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, Milano, Italia.

Titolo del progetto di ricerca: *From crystal nucleation to macroscopic properties: A new protocol to design functional advanced materials*

Tutor: Prof. L. Lo Presti

- 02/2019 - 10/2021: ricercatore a tempo determinato (Chercheur)

Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques, CNRS & Université de Lorraine, Metz, Francia.

Responsabile scientifico del progetto: Dr. A. Genoni. Direttore responsabile della posizione: Prof. X. Assfeld.

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

• Collaborazioni e didattica integrativa (ex Art. 45)

A.A. 2023-2024 - Università degli Studi di Milano

- 02.2024 - 06.2024: didattica integrativa ed esercitazione per l'insegnamento di **Complementi di Matematica e Calcolo Numerico** per il corso di laurea triennale in **Chimica e Chimica Industriale**.
Totale: 24 ore.

- 09.2023 - 01.2024: didattica integrativa ed esercitazione per l'insegnamento di **Chimica Fisica I** per il corso di laurea triennale in **Chimica**.
Totale: 20 ore.

A.A. 2017-2018 - Università degli Studi di Milano

- 09.2017 - 01.2018: didattica integrativa ed esercitazione per l'insegnamento di **Chimica Fisica I e laboratorio** per il corso di laurea triennale in **Chimica**.
Totale: 20 ore.

A.A. 2015-2016, 2014-2015 - Università degli Studi di Milano

- 03.2015 - 06.2015; 03.2016 - 06.2016: assistente di laboratorio dell'insegnamento di **Chimica Organica** del corso di laurea triennale in **Scienze e Tecnologie Alimentari**.
Totale: 48 ore

Altre attività di Art. 45 - Università degli Studi di Milano

- 10.2016 - 11.2018: collaborazione al **Progetto Lauree Scientifiche (PLS)** per la realizzazione di un test di autovalutazione per gli studenti degli istituti superiori.
Totale: 60 ore.

• Cultore della materia

Dall'A.A. 2022/2023 sono stato nominato cultore della materia per l'insegnamento opzionale di **Cristallochimica** del corso di **Laurea Magistrale in Scienze Chimiche**, facoltà di Scienze e Tecnologie dell'Università degli Studi di Milano

• Correlatore di Tesi

Sono stato correlatore di 4 tesi triennali e magistrali.

A.A. 2023-2024:

1. **Margherita Vacchini**

Experimental and Computational Investigation of the intermolecular recognition in advanced molecular materials.

Corso di Laurea in Scienze Chimiche, Facoltà di Scienze e Tecnologie, Università degli Studi di Milano.

2. Lorenzo Ginelli

Studi di aggregazione supramolecolare in spazi altamente confinati.

Corso di Laurea in Chimica, Facoltà di Scienze e Tecnologie, Università degli Studi di Milano

3. Fabio Golini

Studio sperimentale e computazionale di solvati di glucosio.

Corso di Laurea in Chimica, Facoltà di Scienze e Tecnologie, Università degli Studi di Milano

4. Alessio Cambiaghi

Classical dynamics simulation of the liquid and crystal phases of co-crystal formers.

Corso di Laurea in Chimica, Facoltà di Scienze e Tecnologie, Università degli Studi di Milano

- **Rappresentanza**

Dal novembre 2022 ad oggi ho svolto il ruolo di rappresentante degli assegnisti in seno al Consiglio di Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano

DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI

Nel corso della mia carriera, ho svolto attività di ricerca in maniera continuativa nelle seguenti università:

1. Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Chimica (Milano, Italia)

- da ottobre 2015 a dicembre 2017, da aprile 2018 a gennaio 2019 (36 mesi): Dottorato di Ricerca in Chimica. Tutor: Prof. Leonardo Lo Presti, Dr. Carlo Gatti.

- da novembre 2022 ad oggi (21 mesi): Assegno di ricerca. Tutor: Prof. Leonardo Lo Presti

2. CNRS & Université de Lorraine, Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques (Metz, Francia)

- da febbraio 2019 a ottobre 2021 (32 mesi): Ricercatore a tempo determinato (chercheur).

Supervisore progetto scientifico: Dr. A. Genoni

3. University of Aarhus, Department of Chemistry (Aarhus, Danimarca)

- da gennaio 2018 a aprile 2018 (3 mesi): Visiting Phd. Tutor: Prof. Jacob Overgaard

Inoltre, durante il periodo del Dottorato ho partecipato alle seguenti scuole:

1. HERCULES, Higher European Research Course for Users of Large Experimental System

Luogo: Grenoble-Parigi, Francia, 27 febbraio - 30 marzo 2017

Contenuti: approfondimento teorico e pratico delle strumentazioni e delle tecniche di caratterizzazione avanzate presso lo European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) e l'Institut Laue-Langevin (ILL) di Grenoble, il sincrotrone Soleil e il Laboratoire Leon Brillouin (LLB) di Parigi.

2. Robert F. Stewart School on Electron Density and Related Properties

Luogo: Nancy, Francia, 23-26 agosto 2016

Contenuti: approfondimento teorico e pratico dei metodi di analisi computazionale e sperimentale della densità elettronica, di spin e di momento.

3. International Symposium on Material Design & 11th USPEX Workshop

Luogo: Varenna, Italia, 5-9 giugno 2016

Contenuti: approfondimenti sui metodi avanzati di sintesi, caratterizzazione e simulazione di materiali avanzati. Workshop pratico di predizione delle strutture cristalline tramite il software USPEX

4. Italian School on Magnetism

Luogo: Milano, Italia, 18 - 22 aprile 2016

Contenuti: approfondimenti su materiali magnetici e metodi per la loro caratterizzazione e simulazione.

REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE

Durante la mia carriera accademica, ho contribuito alla realizzazione dei seguenti progetti di ricerca:

1. ANR2017 (QuMacroRef)

Titolo: Original Scalable Quantum Mechanical Strategies to Refine High-Resolution Crystallographic Structures of Macromolecules.

Ente finanziatore: The French National Research Agency.

Titolare: Dr. Alessandro Genoni (Université de Lorraine & CNRS).

Finalità: Sviluppo di nuovi metodi di calcolo quantomeccanico per macromolecole, con lo scopo ultimo di applicare i metodi sviluppati per il raffinamento delle strutture cristalline tramite i metodi della Quantum Crystallography.

Risultati raggiunti: Il sottoscritto ha svolto attività di ricerca come “Chercheur” dal 01.02.2019 al 13.10.2021 finanziato da questo progetto, pubblicando **14 lavori peer-reviewed** con argomenti in linea con il progetto su riviste di alto impatto internazionale (Pubblicazioni n. 10,12-13, 16-18, 20-27). I due metodi principali sviluppati nel progetto sono il QM/ELMO, una metodo di calcolo che utilizza orbitali estremamente localizzati per ridurre i tempi di calcolo quantomeccanici su sistemi complessi, e l'ELMO-embedded Hirshfeld Atom Refinement, che permette il raffinamento di strutture cristallografiche sperimentali tramite il supporto di calcoli quantomeccanici.

2. DNR93

Titolo: Topological Descriptors Enabling Novel Dissection of Electron Position and Spin Properties in Complex Molecular Systems

Ente finanziatore: Danmarks Grundforskningsfond.

Titolare: Dr. Carlo Gatti (CNR)

Finalità: Sviluppo di nuovi metodi di analisi della densità elettronica e di spin, sia da un punto di vista sperimentale che teorico.

Risultati raggiunti: Il sottoscritto ha svolto attività di ricerca come studente di dottorato su questi fondi a partire dal 01.10.2015 al 29.01.2019, pubblicando **6 articoli peer-reviewed** relativi al progetto su riviste di alto impatto internazionale (Pubblicazioni n. 2-5, 7, 14). Nuovi protocolli per l'analisi della densità elettronica teorica e sperimentale tramite l'utilizzo della *Source Function*, e la prima analisi della topologia della densità di spin sono due dei principali risultati nel corso di questo progetto.

Ho ricevuto ore di calcolo come investigatore principale per il seguente progetto:

1. Indaco 062024 AD-NOC

Titolo: Study of self-molecular assembly and crystal dissolution to understand nucleation in organic crystals.

Ente: INDACO (UniMi)

Totale: 10000 ore

Finalità: studio dei meccanismi di nucleazione e di crescita cristallina tramite simulazioni di dinamica molecolare di liquidi surraffreddati e nanoparticelle.

Inoltre, ho partecipato alla stesura dei seguenti progetti di tempo computazionale.

1. **LISA (Li08p)**

Titolo: Solid-state quantum investigation of cheap fructose-based metal organic frameworks with strong SHG response (MODEFRUC)

Ente: CINECA, Italia

Totale: 37500 ore

2. **ISCRA C (IsC36)**

Titolo: Quantum modelling of the mode of action of the antimalarial drug piperaquine (MODELPIP)

Ente: CINECA, Italia

Totale: 41667 ore

E di luce di sincrotrone e neutroni:

1. **Proposal CH-5490**

Titolo: Probing the mode of action of 4-aminoquinoline antimalarials by X-ray spectroscopies

Ente: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, Francia.

Date: 30 maggio - 5 giugno 2017

2. **Proposal 404**

Titolo: Spin density reconstruction using the spin source function

Ente: Laboratoire Léon Brillouin (LLB), Gif-sur-Yvette, Francia.

Date: 5 - 12 marzo 2018

3. **Proposal CH-4861**

Titolo: Progress in the understanding of the mode of action of 4-aminoquinoline antimalarials: a low-T study of the heme-binding ability of piperaquine and chloroquine in solution.

Ente: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, Francia.

Date: 8 - 10 dicembre 2016

4. **Proposal n. 72853**

Titolo: Mapping complex hydrogen-bonded networks in quinoine-based antimalarial drugs.

Ente: Institut Laue-Langevin (ILL), Grenoble, Francia.

Date: 7 - 12 settembre 2015

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

Nel corso degli anni ho preso parte a **progetti frutto di collaborazioni con gruppi di ricerca di altre università e/o centri di ricerca nazionali e internazionali** che ha dato come esito la pubblicazione di **11 articoli scientifici** di cui il sottoscritto è coautore. I nomi dei collaboratori di altre istituzioni nazionali e internazionali sono riportati in grassetto. Il nome del sottoscritto è sottolineato. Le affiliazioni degli autori al momento della pubblicazione del lavoro sono riportate dopo la referenza completa.

1. S. A. Zein, M.-C. Bordage, H. N. Tran, G. Macetti, A. Genoni, C. Dal Cappello, S. Incerti, *Monte Carlo simulations of electron interactions with the DNA molecule: a complete set of physics models for Geant4-DNA simulation toolkit*, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Rev. B 2023, 542, 51-60. DOI: 10.1016/j.nimb.2023.06.004

- G. Macetti, A. Genoni, C. Dal Cappello: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)

- S. A. Zein, H. N. Tran, S. Incerti: Université de Bordeaux & CNRS (Bordeaux, Francia)
 - M.-C. Bordage: Université Paul Sabatier (Tolosa, Francia)
2. E. K. Wieduwilt, R. A. Boto, G. Macetti, R. Laplaza, J. Contreras-García, A. Genoni, Extracting Quantitative Information at Quantum Mechanical Level from Noncovalent Interaction Index Analyses, *J. Chem. Theory Comput.* 2023, 19, 1063-1079. DOI: 10.1021/acs.jctc.2c01092
- G. Macetti, E. K. Wieduwilt, A. Genoni: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)
 - R. A. Boto, R. Laplaza, J. Contreras-García: Sorbonne Université & CNRS (Parigi, Francia)
3. G. Macetti, P. Macchi, A. Genoni, *X-ray restrained extremely localized molecular orbitals for the embedding of quantum mechanical calculations*, *Acta Cryst. B* 2021, 77, 695-705. DOI: 10.1107/S2052520621008477
- G. Macetti, A. Genoni: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)
 - P. Macchi: Politecnico di Milano (Milano, Italia)
4. E. K. Wieduwilt, G. Macetti, R. Scatena, P. Macchi, A. Genoni, *Extending Libraries of Extremely Localized Molecular Orbitals to Metal Organic Frameworks: A Preliminary Investigation*, *Crystals* 2021, 11, 207. DOI: 10.3390/cryst11020207
- G. Macetti, E. K. Wieduwilt, A. Genoni: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)
 - R. Scatena: University of Oxford (Oxford, Regno Unito)
 - P. Macchi: Politecnico di Milano (Milano, Italia)
5. S. A. Zein, M.-C. Bordage, Z. Francis, G. Macetti, A. Genoni, C. Dal Cappello, W.-G. Shin, S. Incerti, *Electron transport in DNA bases: An extension of the Geant4-DNA Monte Carlo toolkit*, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 2021, 488, 70-82. DOI: 10.1016/j.nimb.2020.11.021
- G. Macetti, A. Genoni, C. Dal Cappello: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)
 - S. Zein, W.-G. Shin, S. Incerti: Université de Bordeaux & CNRS (Bordeaux, Francia)
 - M.-C. Bordage: Université Paul Sabatier (Tolosa, Francia)
 - Z. Francis: Saomt Joseph University (Beirut, Libano)
6. E. Damgaard-Möller, L. Krause, K. Tolborg, G. Macetti, A. Genoni, J. Overgaard, *Quantification of the Magnetic Anisotropy of a Single-Molecule Magnet from the Experimental Electron Density*, *Angewandte Chemie* 2020, 132, 21389-21395. DOI: 10.1002/anie.202007856
- G. Macetti, A. Genoni: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)
 - E. Damgaard-Möller, L. Krause, K. Tolborg, J. Overgaard: Aarhus University (Aarhus, Danimarca)
7. E. K. Wieduwilt, G. Macetti, L. A. Malaspina, D. Jayatilaka, S. Grabowski, A. Genoni, *Post-Hartree Fock methods for Hirshfeld atom refinement: are they necessary? Investigation of a strongly hydrogen-bonded molecular crystal*, *J. Mol. Struct.* 2020, 1209, 127934. DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.127934
- G. Macetti, E. K. Wieduwilt, A. Genoni: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)
 - L. A. Malaspina: Universität Bremen (Bremen, Germania)
 - D. Jayatilaka: University of Western Australia (Perth, Australia)
 - S. Grabowski: Universität Bern (Berna, Svizzera)
8. G. Bruno, G. Macetti, L. Lo Presti, C. Gatti, *Spin Density Topology*, *Molecules* 2020, 25, 3537
- G. Macetti: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)
 - G. Bruno, L. Lo Presti, C. Gatti: Università degli Studi di Milano (Milano, Italia)
9. A. Genoni, G. Macetti, D. Franchini, S. Pieraccini, M. Sironi, *X-ray constrained spin-coupled technique: theoretical details and further assessment of the method*, *Acta Cryst. A* 2019, 75, 778-797. DOI: 10.1107/S2053273319011021
- G. Macetti, A. Genoni: Université de Lorraine & CNRS (Metz, Francia)

- D. Franchini, S. Pieraccini, M. Sironi: Università degli Studi di Milano (Milano, Italia)

10. C. Gao, G. Macetti, J. Overgaard, *Experimental X-ray electron density study of atomic charges, oxidation states, and inverted ligand field in Cu(CF₃)₄*, Inorg. Chem. 2019, 58, 2133-2139. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.8b03226

- G. Macetti: Università degli Studi di Milano (Milano, Italia)

- C. Gao, J. Overgaard: University of Aarhus (Aarhus, Danimarca)

11. C. Gatti, G. Macetti, R. J. Boyd, C. F. Matta, *An electron density source function study of DNA bases pair in their neutral and ionized ground states*, J. Comp. Chem. 2018, 39, 1112-1128. DOI: 10.1002/jcc.25222

- G. Macetti, C. Gatti: Università degli Studi di Milano (Milano, Italia)

- R. Boyd, C. Matta: Dalhousie University (Halifax, Canada)

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

Seminari (invitato): 1

Contributi orali a congressi come relatore: 9

Contributi poster a congressi come relatore: 6

Altri contributi a congressi come coautore: 6 orali, 2 poster.

Di seguito, la lista dei contributi come relatore

Seminari:

1. Autori: G. Macetti

Titolo: Quantum Crystallography: where synergistic interplay between experiment and computation takes place

Luogo e data: Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica "Giulio Natta", Politecnico di Milano, Milano, Italia, 15 dicembre 2023

Contributi orali a congressi come relatore:

1. Autori: G. Macetti, L. Sironi, L. Lo Presti

Titolo: Symmetry-constrained Monte Carlo to predict the experimental crystal structure of small organic molecules

Evento: 50th AIC meeting (Associazione Italiana di Cristallografia)

Luogo e data: Bologna, 5-8 settembre 2023

2. Autori: G. Macetti, E. K. Wieduwilt, A. Genoni

Titolo: Accurate refinement of hydrogen atoms positions through a quantum mechanical embedding scheme based on extremely localized molecular orbitals

Evento: 25th Congress of the International Union of Crystallography

Luogo e data: Online/Praga, Repubblica Ceca, 14-22 agosto 2021

3. Autori: G. Macetti, E. K. Wieduwilt, A. Genoni

Titolo: QM/ELMO: an extremely localized molecular orbital-based embedding strategy for ground and excited states

Evento: Réseau de Chimie Théorique du Grand Est (RCTGE 2021)

Luogo e data: Online, 17 - 18 maggio 2021

4. Autori: G. Macetti, E. K. Wieduwilt, A. Genoni

Titolo: Going beyond the ELMO approximation: the QM/ELMO approach

Evento: International Charge Density Meeting (ICDM) 2019

Luogo e data: Gottinga, Germania, 21-26 luglio 2019

5. Autori: G. Macetti, L. Lo Presti, C. Gatti

Titolo: Electron Population Analysis using the Source Function Descriptor

Evento: Center for Material Crystallography (CMC) Meeting

Luogo e data: Gottinga, Germania, 9 novembre 2018

6. Autori: G. Macetti, L. Lo Presti, C. Gatti

Titolo: Full Electron Population Analysis Through the Integration of the Source Function Descriptor

Evento: ESCB2 - Second European Symposium on Chemical Bonding

Luogo e data: Oviedo, Spagna, 3-7 settembre 2018

7. Autori: G. Macetti, L. Lo Presti, C. Gatti

Titolo: Spin density accuracy and distribution in azido Cu(II) complexes: a source function analysis

Evento: Center for Material Crystallography (CMC) Meeting

Luogo e data: Aarhus, Danimarca, 2-3 ottobre 2017

8. Autori: G. Macetti, L. Lo Presti, C. Gatti

Titolo: Spin Density Interpretation Through Source Function in Cu Azides

Evento: Center for Material Crystallography (CMC) Meeting

Luogo e data: Gottinga, Germania, 13 gennaio 2017

9. Autori: G. Macetti, S. Rizzato, L. Loconte, C. Gatti, L. Lo Presti

Titolo: Study of the key interactions in the self-recognition of the antimalarial drug chloroquine

Evento: ECDM VII, European Charge Density Meeting

Luogo e data: Varsavia, Polonia, 26 giugno - 1 luglio 2016

Contributi Poster a congressi come relatore:

1. Autori: G. Macetti, L. Sironi, L. Lo Presti

Titolo: Symmetry-constrained Monte Carlo for crystal structure prediction

Evento: European Crystallographic Meeting (ECM34)

Luogo e data: Padova, 26-30 agosto 2024 (poster accettato)

2. Autori: G. Macetti, P. Macchi, A. Genoni

Titolo: Embedded quantum mechanical calculations using X-ray restrained extremely localized molecular orbitals

Evento: CECAM, second discussion meeting on quantum crystallography

Luogo e data: Online, 9-12 settembre 2021

3. Autori: G. Macetti, E. K. Wieduwilt, A. Genoni

Titolo: Accurate refinement of Hydrogen atoms positions through a quantum mechanical embedding scheme based on extremely localized molecular orbitals

Evento: Quantum Crystallography Online Meeting (QCrOM 2020)

Luogo e data: Online, 27-29 agosto 2020

4. Autori: G. Macetti, S. Rizzato, L. Loconte, C. Gatti, L. Lo Presti

Titolo: New EXAFS evidences on the mechanism of action of 4-aminoquinoline drugs

Evento: HERCULES School

Luogo e data: Grenoble, Francia, 27 febbraio - 30 marzo 2017

5. Autori: G. Macetti, S. Rizzato, L. Loconte, C. Gatti, L. Lo Presti
Titolo: Experimental and theoretical study of the mechanism of action of the antimalarial drug chloroquine
Evento: MISCA IV, Meeting of Italian and Spanish Crystallographic Association
Luogo e data: Puerto de la Cruz, Tenerife, Spagna, 21-25 giugno 2016 (invited contribution)
6. Autori: G. Macetti, S. Rizzato, L. Loconte, C. Gatti, L. Lo Presti
Titolo: Understanding self-recognition in antimalarial drug chloroquine: an experimental and theoretical charge density study
Evento: SAGAMORE XVIII, Conference on Charge, Spin and Momentum Densities
Luogo e data: S. Margherita di Pula (Ca), Italia, 7-12 giugno 2015

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

1. Premio per la migliore tesi magistrale in ambito cristallografico 2016, conferito dall'Associazione Italiana di Cristallografia. Il premio è stato consegnato presso la conferenza internazionale MISCA IV - meeting of the italian and spanish crystallographic associations, tenutasi a Puerto de la Cruz, Spagna, dal 21 al 25 giugno 2016.
2. Premio per la migliore *poster presentation*, conseguito durante il Quantum Crystallographic Online Meeting 2020 tenutosi dal 27 al 29 agosto 2020.
3. Premio *IUCr Young Scientist Award* del valore di 230 euro conferito durante la conferenza ECDM7, tenutasi dal 26 giugno al 1 luglio 2016 a Varsavia, Polonia.

ATTIVITÀ DI TERZA MISSIONE

1. Partecipazione all'attività di Open Day di Ateneo, svoltasi il 22 giugno 2024.
2. Ideazione e realizzazione del progetto "Banco di Prova". Il progetto prevedeva attività di divulgazione e avvicinamento ai primi esperimenti scientifici per gli studenti delle scuole primarie e secondarie di primo grado. Il progetto si è tenuto presso il centro ricreativo giovani della parrocchia di Chiari (BS). Lo scopo finale dell'attività era quella di avvicinare i giovani studenti alle materie STEM ed è stato svolto tra il novembre 2022 e il febbraio 2023 per un totale di 20 ore.

ATTIVITÀ EDITORIALE

Ad oggi, svolgo il ruolo di revisore per le seguenti riviste internazionali:

- Journal of Chemical Theory and Computation (ACS)
- ACS Omega (ACS)
- Acta Crystallographica B (IUCr)
- Journal of Molecular Structure (Elsevier)

PRODUZIONE SCIENTIFICA

INDICATORI BIBLIOMETRICI SINTETICI

Indice H: 14
 Lavori pubblicati: 33 (2015-oggi)
 Numero di citazioni: 350 (2015-oggi)

ORCID ID: 0000-0001-9935-7955
 Scopus ID: 57191429832

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

Articoli su riviste internazionali: 31

31. **G. Macetti**, L. Sironi, C. Rovida, I. Geremia, R. Soave, L. Lo Presti, *On the solubility of azodicarbonamide in water/DMSO mixtures: an experimental and computational study*, R. Soc. Open Sci. **2024**, *11*, 231831. DOI: 10.1098/rsos.231831

30. M. Manenti, T. Villa, **G. Macetti**, A. Silvani, *Alkene carboamination/oxidative denitrogenation of 3-allyl-3-hydrazinylindolin-2-ones: one-pot entry to spiro cyclopropyloxindoles*, Org. Biomol. Chem. **2024**, *22*, 2124-2136. DOI: 10.1039/D3OB02115G

29. L. Sironi, **G. Macetti**, L. Lo Presti, *Molecular dynamics investigation of benzoic acid in confined spaces*, Phys. Chem. Chem. Phys., **2023**, *25*, 28006-28019. DOI: 10.1039/d3cp02886k

28. S. A. Zein, M.-C. Bordage, H. N. Tran, **G. Macetti**, A. Genoni, C. Dal Cappello, S. Incerti, *Monte Carlo simulations of electron interactions with the DNA molecule: a complete set of physics models for Geant4-DNA simulation toolkit*, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Rev. B **2023**, *542*, 51-60. DOI: 10.1016/j.nimb.2023.06.004

27. E. K. Wieduwilt, R. A. Boto, **G. Macetti**, R. Laplaza, J. Contreras-García, A. Genoni, *Extracting Quantitative Information at Quantum Mechanical Level from Noncovalent Interaction Index Analyses*, J. Chem. Theory Comput. **2023**, *19*, 1063-1079. DOI: 10.1021/acs.jctc.2c01092

26. **G. Macetti**, A. Genoni, *Introduction of a weighting scheme for the X-ray restrained wavefunction approach: advantages and drawbacks*, Acta Cryst. A **2023**, *79*, 25-40. DOI: 10.1107/S2053273322010221

25. **G. Macetti**, A. Genoni, *Initial Maximum Overlap Method Embedded with Extremely Localized Molecular Orbitals for Core-Ionized States of Large Systems*, Molecules **2023**, *28*, 136. DOI: 10.3390/molecules28010136

24. **G. Macetti**, P. Macchi, A. Genoni, *X-ray restrained extremely localized molecular orbitals for the embedding of quantum mechanical calculations*, Acta Cryst. B **2021**, *77*, 695-705. DOI: 10.1107/S2052520621008477

23. **G. Macetti**, A. Genoni, *Initial Maximum Overlap Method for Large Systems by the Quantum Mechanics/Extremely Localized Molecular Orbital Embedding Technique*, J. Chem. Theory Comput. **2021**, *17*, 4169-4182. DOI: 10.1021/acs.jctc.1c00388

22. **G. Macetti**, A. Genoni, *Three-Layer Multiscale Approach Based on Extremely Localized Molecular Orbitals to Investigate Enzyme Reactions*, J. Phys. Chem. A **2021**, *125*, 6013-6027. DOI: 10.1021/acs.jpca.1c05040

21. **G. Macetti**, E. K. Wieduwilt, A. Genoni, *QM/ELMO: a Multi-Purpose Fully Quantum Mechanical Embedding Scheme Based on Extremely Localized Molecular Orbitals*, J. Phys. Chem. A **2021**, *125*, 2709-2726. DOI: 10.1021/acs.jpca.0c11450

20. E. K. Wieduwilt, **G. Macetti**, R. Scatena, P. Macchi, A. Genoni, *Extending Libraries of Extremely Localized Molecular Orbitals to Metal Organic Frameworks: A Preliminary Investigation*, Crystals **2021**, *11*, 207. DOI: 10.3390/cryst11020207

19. S. A. Zein, M.-C. Bordage, Z. Francis, **G. Macetti**, A. Genoni, C. Dal Cappello, W.-G. Shin, S. Incerti, *Electron transport in DNA bases: An extension of the Geant4-DNA Monte Carlo toolkit*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **2021**, 488, 70-82. DOI: 10.1016/j.nimb.2020.11.021
18. E. K. Wieduwilt, **G. Macetti**, A. Genoni, *Climbing the Jacob's Ladder of Structural Refinement: Introduction of a Localized Orbital-Based Embedding for Accurate X-ray Determination of Hydrogen Atom Positions*, J. Phys. Chem. Lett. **2021**, 12, 463-471. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.0c03421
17. **G. Macetti**, A. Genoni, *Quantum mechanics/extremely localized molecular orbital embedding technique: Theoretical foundations and further validation*, Adv. Quantum Chem. **2021**, 83, 269, 285. DOI: 10.1016/bs.aiq.2021.05.004
16. **G. Macetti**, A. Genoni, *Quantum Mechanics/Extremely Localized Molecular Orbital Embedding Strategy for Excited States: Coupling to Time-Dependent Density Functional Theory and Equation-of-Motion Coupled Cluster*, J. Chem. Theory Comput. **2020**, 16, 7490-7506. DOI: 10.1021/acs.jctc.0c00956
15. E. Damgaard-Möller, L. Krause, K. Tolborg, **G. Macetti**, A. Genoni, J. Overgaard, *Quantification of the Magnetic Anisotropy of a Single-Molecule Magnet from the Experimental Electron Density*, Angewandte Chemie **2020**, 132, 21389-21395. DOI: 10.1002/anie.202007856
14. G. Bruno, **G. Macetti**, L. Lo Presti, C. Gatti, *Spin Density Topology*, Molecules **2020**, 25, 3537. DOI: 10.3390/molecules25153537
13. **G. Macetti**, E. K. Wieduwilt, X. Assfeld, A. Genoni, *Localized Molecular Orbital-Based Embedding Scheme for Correlated Methods*, J. Chem. Theory. Comput. **2020**, 16, 3578-3596. DOI: 10.1021/acs.jctc.0c00084
12. E. K. Wieduwilt, **G. Macetti**, L. A. Malaspina, D. Jayatilaka, S. Grabowski, A. Genoni, *Post-Hartree Fock methods for Hirshfeld atom refinement: are they necessary? Investigation of a strongly hydrogen-bonded molecular crystal*, J. Mol. Struct. **2020**, 1209, 127934. DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.127934
11. G. Finocchio, S. Rizzato, **G. Macetti**, G. Tusha, L. Lo Presti, *Unravelling the Chemistry of the [Cu(4,7-dichloroquine)₂Br₂]₂ Dimeric Complex Through Structural Analysis: a Borderline Ligand Field Case*, Crystals **2020**, 10, 477. DOI: 10.3390/cryst10060477
10. **G. Macetti**, A. Genoni, *Quantum Mechanics/Extremely Localized Molecular Orbital Method: A Fully Quantum Mechanical Embedding Approach for Macromolecules*, J. Phys. Chem. A **2019**, 123, 9420-9428. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b08882
9. A. Genoni, **G. Macetti**, D. Franchini, S. Pieraccini, M. Sironi, *X-ray constrained spin-coupled technique: theoretical details and further assessment of the method*, Acta Cryst. A **2019**, 76, 778-797. DOI: 10.1107/S2053273319011021
8. P. Sacchi, L. Loconte, **G. Macetti**, S. Rizzato, L. Lo Presti, *Correlation of crystal structure and solubility in organic salts: the case of the antiparasitic drug piperazine*, Cryst. Growth Des. **2019**, 19, 1399-1410. DOI: 10.1021/acs.cgd.8b01794
7. C. Gao, **G. Macetti**, J. Overgaard, *Experimental X-ray electron density study of atomic charges, oxidation states, and inverted ligand field in Cu(CF₃)₄*, Inorg. Chem. **2019**, 58, 2133-2139. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.8b03226

6. A. Gionda, **G. Macetti**, L. Loconte, S. Rizzato, A. M. Orlando, C. Gatti, L. Lo Presti, *A variable-temperature X-ray diffraction and theoretical study of conformational polymorphism in a complex organic molecule (DTC)*, RSC Adv. **2018**, 8, 38445-38454. DOI: 10.1039/C8RA08063A
 5. C. Gatti, **G. Macetti**, R. J. Boyd, C. F. Matta, *An electron density source function study of DNA bases pair in their neutral an ionized ground states*, J. Comp. Chem. **2018**, 39, 1112-1128. DOI: 10.1002/jcc.25222
 4. **G. Macetti**, L. Lo Presti, C. Gatti, *Spin density accuracy and distribution in azido Cu(II) complexes: a source function analysis*, J. Comp. Chem. **2018**, 39, 587-603. DOI: 10.1002/jcc.25150
 3. C. Gatti, **G. Macetti**, L. Lo Presti, *Insights on spin delocalization and spin polarization mechanism in crystals of azido Cu(II) dinuclear complexes through the electron spin density source function*, Acta Cryst. B **2017**, 73, 565-583. DOI: 10.1107/S2052520617008083
 2. **G. Macetti**, L. Loconte, S. Rizzato, C. Gatti, L. Lo Presti, *Intermolecular recognition of the antimalarial drug chloroquine: a QTAIM-DFT investigation of the hydrated dihydrogen phosphate salt from the 103 K X-ray structure*, Cryst. Growth Des. **2016**, 16, 6043-6054. DOI: 10.1021/acs.cgd.6b01069
 1. **G. Macetti**, S. Rizzato, F. Beghi, L. Silvestrini, L. Lo Presti, *On the molecular basis of the activity of the antimalarial drug chloroquine: EXAFS-assisted DFT evidence of a direct Fe-N bond with free heme in solution*, Phys. Scr. **2016**, 91, 02300. DOI: 10.1088/0031-8949/91/2/023001
- Capitoli di libro: 2
2. **G. Macetti**, L. Sironi, L. Lo Presti, *Classical Molecular Dynamics Simulation of Molecular Crystals and Materials: Old Lessons and New Perspectives in Comprehensive Computational Chemistry*, Ed. R. J. Boyd and M. Yanez, Elsevier, **2024**, 3, 777-803. DOI: 10.1016/B978-0-12-821978-2.00107-0
 1. D. Ceresoli, **G. Macetti**, G. Saleh, C. Gatti, *Chemical bonding investigation for materials in Computational Materials Discovery*, Ed. A. R. Oganov, G. Saleh, A. G. Kvashin, The Royal Society of Chemistry, **2019**, 117-175. DOI: 10.1039/9781788010122-00117

Data

18.07.2024

Luogo

Milano