



AL MAGNIFICO RETTORE
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

COD. ID: 4345

Il sottoscritto chiede di essere ammesso a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica, responsabile scientifico il **Prof. Michele Ceotto**

Chiara Donatella Aieta

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

Cognome	Aieta
Nome	Chiara Donatella
Data Di Nascita	20/06/1988

OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura
Assegnista di tipo B	Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Titolo	Corso di studi	Università	anno conseguimento titolo
Laurea Magistrale o equivalente	Scienze Chimiche	Università degli Studi di Milano	2014
Dottorato Di Ricerca	Chimica	Università degli Studi di Milano	2018

LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Inglese	C1

ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

La mia attuale attività di ricerca nel campo della chimica fisica teorica e computazionale riguarda lo sviluppo di nuovi metodi per la simulazione della spettroscopia, come parte del progetto ERC "SEMICOMPLEX" guidata dal Prof. M. Ceotto. In particolare ho contribuito a sviluppare un metodo che partendo dalla simulazione di spettri di potenza semi-classici riesce a ricavare la funzione d'onda vibrazionali di molecole sia nello stato fondamentale che nello stato eccitato e a visualizzarli nello spazio 3D come densità nucleari. Un'altra linea di ricerca riguarda simulazioni semi-classiche di spettri vibrazionali che includano effetti dell'interazione con l'ambiente e di temperatura. Questo progetto mi permetterà di mettere a frutto il periodo di visita che ho trascorso nel gruppo del Prof. Gunnar Nyman all'Università di Göteborg. Lo scopo della visita era apprendere la teoria di Feynman-Kleinert che viene utilizzata per approssimare convenientemente l'operatore Boltzmann. Infatti, l'approssimazione dell'operatore di Boltzmann può essere usato per campionare le condizioni iniziali necessarie per ottenere spettri semi-classici di molecole a crescente dimensionalità inserite in un ambiente. Precedentemente, ho ottenuto il dottorato di ricerca nel campo della dinamica di reazione teorica. Il lavoro che ho svolto durante il dottorato aveva due obiettivi. Innanzitutto, da un punto di vista



computazionale, ho esteso l'applicabilità del codice MultiWell del Prof. Barker per calcolare costanti di velocità con correzione di tunneling semiclassica per sistemi complessi, come quelli di interesse per la sintesi in chimica organica. Sono uno sviluppatore ufficiale di MultiWell a partire dalla versione del 2016. In secondo luogo, ero impegnato nella ricerca di nuovi approcci quantistici e semiclassici in grado di fornire, con elevata precisione e basso sforzo numerico, le costanti cinetiche di reazioni semplici.

ATTIVITÀ PROGETTUALE

Anno	Progetto
2019	Principal Investigator, progetto IS CRA-C presso CINECA "heavyTUN": studio di cinetiche di reazione che coinvolgono tunneling di atomi pesanti in approssimazione semiclassica. Budget 45000 ore standard (valore indicativo 4500€).

CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

Data	Titolo	Sede
17-21 giugno 2019	Invited talk: "Parallel Implementation of Semiclassical Transition State Theory and its Application to High-dimensional Tunneling Reactions".	XIXth International Workshop on Quantum Atomic and Molecular Tunneling Systems, Borovets, Bulgaria.
26 settembre 2018	Poster communication: "A Quantum Method for Thermal Rate Constant Calculations from Stationary Phase Approximation of the Thermal Flux-flux Correlation Function Integral".	MolSimEng, Milano, Italia.
16-18 agosto 2017	Poster communication: "A Quantum Method for Thermal Rate Constant Calculations from Stationary Phase Approximation of the Thermal Flux-flux Correlation Function Integral".	Swedish Theoretical Chemistry 2017 - Bridging gaps, Göteborg, Sweden.
20 giugno 2017	Seminar: "A Quantum Method for Thermal Rate Constant Calculations from Stationary Phase Approximation of the Thermal Flux-flux Correlation Function Integral".	Göteborg University, Sweden.
19-21 settembre 2016	Poster communication and "lightning presentation": "A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants".	Reaction Rate Theory: Faraday Discussion, Cambridge, United Kingdom.
30 Settembre 2016	Poster communication: "A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants".	MolSimEng, Milano, Italia.
13-17 giugno 2016	Poster communication: "A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal	Path Integral Quantum Mechanics: Theory, Simulation and Application, CECAM-HQ-EPFL,



	Reaction Rate Constants (Part I)"	Lausanne, Switzerland.
6-10 Giugno 2016	Contributed Talk: "A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants".	Different Routes to Quantum Molecular Dynamics, CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland.

PUBBLICAZIONI

Articoli su riviste

C. Aieta, F. Gabas, and M. Ceotto "Parallel Implementation of Semiclassical Transition State Theory" *J. Chem. Theory Comput.* **15**, 4, 2142 (2019).

C. Aieta, and 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).

C. Aieta, F. Gabas, and M. Ceotto "An Efficient Computational Approach for the Calculation of the Vibrational Density of States" *J. Phys. Chem. A* **120**, 4853 (2016).

C. Marchiori, G. Di Liberto, G. Soliveri, L. Loconte, L. Lo Presti, D. Meroni, M. Ceotto, C. Oliva, S. Cappelli, G. Cappelletti, **C. Aieta**, and 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 (2014).

F. Spadavecchia, M. Ceotto, L. Lo Presti, **C. Aieta**, I. Biraghi, D. Meroni, S. Ardizzone and G. Cappelletti "Second Generation Nitrogen Doped Titania Nanoparticles: A Comprehensive Electronic and Microstructural Picture" *Chinese J. of Chem.* **32**, 1195 (2014).

ALTRE INFORMAZIONI

Sviluppatore ufficiale dal 2016 della suite di codici MultiWell: 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-2019 Software Suite; J.R. Barker, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA, 2019; <http://clasp-research.engin.umich.edu/multiwell/>.

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

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

Luogo e data: Milano, 26/09/2019

FIRMA