

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Procedura di selezione per la chiamata a professore di II 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) presso il Dipartimento di CHIMICA (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 14 del 19.02.2019- Codice concorso 4010)

**[Massimo Mella]
CURRICULUM VITAE**

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

COGNOME	MELLA
NOME	MASSIMO
DATA DI NASCITA	[17, 03, 1968]

Specifiche esperienze professionali caratterizzate da attività di ricerca attinenti al settore concorsuale per cui è presentata la domanda di partecipazione alla procedura comparativa.

- 11/1993-10/1996: **Ph.D. student.** Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano (I). dal 01-11-1993 al 31-10-1996
- 09/1995-04/1996: **Research Scholar** in the laboratory of Prof. James B. Anderson, Pennsylvania State University, State College (PA) USA dal 01-09-1995 al 30-04-1996
- 02/1997-04/1998: **CNR Research Fellow**, Centro per lo Studio e Ricerca sulla Struttura e Reattività Chimica, Italian National Research Council (CNR, Milano, I) dal 01-02-1997 al 30-04-1998
- 05/1998-05/1999: **Post Doctorate Research Fellow**, Dipartimento di Chimica Fisica, Università degli Studi di Milano dal 01-05-1998 al 01-05-1999
- 05/1999-09/2002: **Research Technician**, Spectroscopy and Theoretical Chemistry Section, Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano dal 01-05-1999 al 30-09-2002
- Oct 2002-Sep 2007: **Advanced Research Fellow**; quinquennial research grant awarded by Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC-UK, EPSRC GR/R77803/02). During the fellowship, the Applicant has been hosted by the Physical and Theoretical Chemistry Laboratory at University of Oxford and by the School of Chemistry at Cardiff University
- Gen 2003-Mag 2006: **Junior Research Fellow** of the Wolfson College, University of Oxford (fellowship awarded for scientific merits)
- 02/2004: awarding of a **Lectureship** in Theoretical Chemistry at Cardiff University motivated by the Applicant's for Research Activity dal 01-02-2004 al 30-09-2007
- 10/2007: awarding of a tenured **Readership** in Theoretical Chemistry at Cardiff University motivated by the Applicant's Research Merits. dal 01-10-2007 al 30-09-2009
- 01/01/2008-31/12/2011: Invited member of the **Steering Committee** for the Theoretical Chemistry Group (TCG), Royal Society of Chemistry.
- Ott 2011-Ago 2012: **Visiting Research Professorship** at the Laboratoire Collisions Aggregats Réactivité-CNRS (Toulouse, F)-Université Paul Sabatier (Toulouse, F)
- 17/01/2012: appointed **Jury member**, Ph.D. defense Mr. Ji Jiang, Université Paris Est (Marne-la-Vallée). dal 17-01-2012 al 17-01-2012
- 23/07/2012: **Jury member**, Ph.D. defense, Mr. Wesley Unn-Toc, Université Paul Sabatier, Toulouse. dal 23-07-2012 al 23-07-2012
- 01/10/2012-presente: Member of the **Collegio dei Docenti** for the "Dottorato in Scienze Chimiche" (XXVIII cohort) and Dottorato in Scienze Chimiche ed Ambientali (since the XXIX cohort)
- 22 Dicembre 2013: conferma nel ruolo di **Ricercatore Universitario** a Tempo Indeterminato nel Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02 - CHIMICA FISICA, Settore Concorsuale 03/A2
- Abilitazione al ruolo di **Professore di II Fascia**, settore concorsuale 03/B1 (fine 2013)
- Abilitazione al ruolo di **Professore di II Fascia**, settore concorsuale 03/A2 (inizio 2014)

- 01/10/2014: presa di servizio come **Professore di II Fascia**, settore concorsuale 03/A2, presso il Dipartimento di Scienza ed Alta Tecnologia, Università degli Studi dell'Insubria
- **Jury member**, Ph.D. defense, Mrs. Simona Matrella, Università degli Studi di Salerno, Fisciano (SA, I) dal 16-03-2017 al 16-03-2017
- Abilitazione al ruolo di **Professore di I Fascia**, settore concorsuale 03/A2 (dal 10/04/2017)
- Abilitazione al ruolo di **Professore di II Fascia**, settore concorsuale 02/B2 (dal 10/04/2017)
- Abilitazione al ruolo di **Professore di I Fascia**, settore concorsuale 03/B1 (dal 12/04/2017)
- Abilitazione al ruolo di Professore di I Fascia, settore concorsuale 02/B2 (dal 03/04/2018)

Autore di 104 lavori pubblicati su riviste scientifiche internazionali in campo chimico-fisico, dei polimeri, ed in chimica generale e metallorganica (H-index=26), di 4 contributi pubblicati su **libri** in ambito chimico teorico, e di varie presentazioni a congressi nazionali ed internazionali. La lista completa delle presentazioni è riportata di seguito, all'interno del Curriculum.

Responsabilità scientifica per **progetti di ricerca** internazionali e nazionali, ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari

- EPSRC GR/R77803/02 02/2002: Quantum Stochastic Simulation of Proton Transport and Hopping in Molecular Clusters and Bulk Liquids, **EPSRC Advanced Research Fellowship** (£280000) dal 01-10-2002 al 30-09-2007
- EPSRC EP/C528301/1 01/2005 Advancing the applicability of quantum Monte Carlo: the calculation of EPR and NMR spectroscopic constants, **EPSRC First Grant Scheme** (£113000) dal 01-01-2005 al 30-06-2006
- **MIUR-borsa di dottorato di ricerca** in regime di co-tutorato 05/2005: Cluster metallici in gocce di He ultra fredde: studio teorico della loro struttura, dell'energia di legame e della sintesi, borsa di dottorato di ricerca finanziata dal MIUR in regime di cotutorato (€40000) in collaborazione con Prof. G. Morosi e Dr. D. Bressanini (Università degli Studi dell'Insubria, I) dal 01-11-2005 al 31-10-2008
- MIUR-procedura per **Rientro Cervelli** (2009) Bridging the Gap between Molecular Collision Events and Condensed Phases: Theoretical study of the Nucleation and Evaporation Processes of nano-Drops, contratto di ricerca ed insegnamento finanziato dal MIUR (€115000), sponsorizzato dal Dipartimento di Scienze Chimiche ed Ambientali, Università dell'Insubria dal 01-10-2009 al 22-12-2010
- PRIN 2011 (co-investigator, Uninsubria research unit) Integrated supramolecular technologies for chemical information processing: advanced molecular devices and materials (InfoChem)

Direzione o partecipazione alle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni a livello nazionale o internazionale

Research active in the field of Theoretical/Computational Chemistry since his graduation in 1993, initially within the research group led by Prof. Gabriele Morosi. After moving to the United Kingdom in 2002 to cover the position of **EPSRC Advanced Research Fellow**, initially hosted in the Physical and Theoretical Chemistry Laboratory - University of Oxford, and successively migrated to the School of Chemistry at Cardiff University, the candidate has been leading his own research activity and group, with many publications involving foreign co-investigators. The research activity of the Applicant led to the award by Cardiff University of a **Lecturership** in Theoretical Chemistry, and successively to the be tenured as **Reader** (please, see CUN equipollence table). The **group** is currently composed by the Applicant, a Ph.D. student, and a Master student. Four successful **Ph.D. defenses** have been carried out under the supervision or co-supervision of the Applicants. Salaries for **two Post Doctoral research associated** (Dr. Par Hakansson (CU) and Dr. Marina Casartelli (Uninsubria)) were secured via competitive funding applications. The following list provides the names of the senior researchers with whom collaborative research projects have been undertaken as can be inferred from the publication list, visiting research or professorship grants.

- 1) Prof. E. Curotto (Arcadia University, USA): development and application of quantum stochastic methods for the study of molecular aggregates.
- 2) Dr. F. Cargnoni (ISTM-CNR) e Prof. M. Raimondi (Università degli Studi di Milano): study of intermolecular forces with ab initio electronic structure methods.
- 3) Dr. L. Izzo (Università degli Studi di Salerno): polymer conformation in water solution; impact of hydrophobic substituents on polymer conformation; polyelectrolytic materials with bactericidal properties and biomedical applications; catalytic mechanism in olefin polymerization.
- 4) Dr. D. Bressanini (Università degli Studi dell'Insubria): development and application of

stochastic methods for the leptonic structure of atoms and molecules.

5) Prof. D. Pappalardo (Università degli Studi del Sannio): metallorganic complex reactivity.

6) Dr. A. Ponti (ISTM-CNR): study of protonated molecular systems and metallic nanoparticles.

7) Dr. Nadine Halberstadt (Laboratoire Collisions Aggregats Réactivité-CNRS): theoretical investigation of quantum dynamics in clusters and reaction theory.

8) Dr. Giovanni Vigliotta (Università degli Studi di Salerno): polyelectrolytic materials with bactericidal properties and biomedical applications.

9) Prof. Manuel Barranco Gomez (Universitat de Barcelona): dynamical phenomena in pure or doped He droplets.

10) Prof. Fabrizio Cavani (Università degli Studi di Bologna): catalysis of organic reactions (redox, Lebedev e Guerbet) by nano-structured Alkali-Earth oxides.

11) Prof. Valeria Amendola (Università degli Studi di Pavia): supramolecular chemistry and anion recognition.

12) Sir Prof. David Clary (University of Oxford): protonated water clusters.

13) Dr. Simona Losio (ISMAR-CNR Milano): Ziegler-Natta olefin polymerization.

14) Dr. Carlo Lucarelli (DiSAT-Insubria): heterogeneous catalysis.

15) Prof. Angelo Vaccari (Università degli Studi di Bologna): heterogeneous catalysis.

16) Stefania Albonetti (Università degli Studi di Bologna): heterogeneous catalysis.

17) Rita Mazzoni (Università degli Studi di Bologna): homogeneous catalysis.

Attività didattiche e gestionali

Professore di Seconda Fascia, Settore Concorsuale 03/A2, Settore Scientifico Disciplinare CHIM/02 Chimica Fisica, Dipartimento di Scienza ed Alta Tecnologia, Università degli Studi dell'Insubria (dal 10/2014)

- Impegno didattico frontale:

Chimica Teorica (7 CFU, dall'AA 2009/2010 all'AA 2015/2016, 8 CFU dal successivo), un corso attivo nel biennio della Laurea Magistrale in Chimica;

Metodi Matematici per i Chimici (3 CFU, AA 2014/2015 ed 2017/2018) all'interno del Corso di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche ed Ambientali (DISCA, Università degli Studi dell'Insubria);

Chimica Fisica I - Modulo A (6 CFU, dall'AA 2014/2015 al AA 2017/2018) all'interno del Corso di Laurea Triennale (Laurea di I livello) in Chimica e Chimica Industriale.

Micelle, Colloidi e Superfici (6 CFU, dall'AA 2015/2016 all'AA 2017/2018) all'interno del Corso di Laurea Triennale (Laurea di I livello) in Chimica e Chimica Industriale.

Chimica Generale ed Inorganica (4.25 CFU di 8 CFU, AA 2018/2019, incarico esterno nel CdL di Biotecnologie Mediche, Università degli Studi di Milano)

- Impegno didattico integrativo:

1. Esami di Laurea:

a. dall'AA 2014/2015: Chimica e Chimica Industriale, Magistrale in Chimica (in media 10 ore/AA);

2. Attività di orientamento e tutoraggio:

a. tutoraggio delle matricole del Corso di Laurea in Chimica e Chimica Industriale (dall'AA 2014/2015, 10 ore/AA);

b. tutoraggio degli studenti del Corso di Laurea Specialistica in Chimica Industriale a riguardo degli argomenti del Corso di Programmazione e Simulazione (AA 2013/2014, 15 ore).

3. Assistenza ai Corsi, Esercitazioni e partecipazione Commissioni d'Esame;

4. Seminari divulgativi tenuti nelle Scuole Superiori all'interno del progetto Lauree Scientifiche e supervisore di studenti in stage all'interno dello schema Alternanza Scuola-Lavoro;

5. Membro della Commissione per l'orientamento (dall'AA 2014/15, corsi di Laurea in Chimica e Chimica Industriale, e Magistrale in Chimica): responsabile organizzazione Stage Curricolari per studenti delle medie superiori all'interno del progetto Alternanza Scuola-Lavoro e Stage Estivi (dall'AA 2014/15 all'AA2017/2018).

6. Membro della Commissione AiQUA per il CdL in Chimica e Chimica Industriale e CdLM in Chimica dall'AA 2016/2017.

7. Membro delle Commissioni d'Ateneo per l'Orientamento ed il Placement.

Giugno 2011-: membro della **commissione paritetica** per la retribuzione della Didattica ai Ricercatori Universitari.

Novembre 2012: eletto come **Rappresentante di Fascia** (RU) nel Senato Accademico dell'Università degli Studi dell'Insubria

Luglio 2013: membro della **Commissione Paritetica** per la definizione del Regolamento per la distribuzione dei fondi premiali per l'incentivazione a norma dell'art. 29, comma 19, della legge 30 dicembre 2010, n. 240

Dicembre 2010: **Ricercatore Universitario Non Confermato** presso Dipartimento di Scienze ed Alta Tecnologia, Università degli Studi dell'Insubria-Como

- Impegno di Ricerca:

Energetica, struttura, spettroscopia e dinamica di specie atomiche, molecolari, e loro aggregati assorbiti da/su gocce di elio superfluido;

Sviluppo ed applicazione di metodi computazionali per sistemi quantistici e quasi-quantistici o semiclassici;

Sviluppo ed applicazione di metodologie avanzate per il campionamento dello spazio delle configurazioni di sistemi frustrati o con superficie d'energia frastagliate (e.g. aggregati molecolari e di catene polimeriche);

Studio della reattività catalitica di complessi metallorganici, con particolare focalizzazione sulle reazioni di polimerizzazione tipo Ziegler-Natta;

Studio teorico e computazionale delle forze d'interazione intermolecolari e delle loro conseguenze strutturali;

Teoria ed implementazione di metodi e modelli computazionali per lo studio della dinamica reattiva di specie di rilevanza atmosferica e dei processi di nucleazione in fase gas;

Sviluppo ed applicazione di metodi stocastici per lo studio della struttura elettronica e leptonica di sistemi fortemente correlati.

- Impegno didattico frontale:

Chimica Teorica (6 CFU, AA 2009/2010, 2010/2011 e 2011/2012), un corso attivo nel biennio della Laurea Specialistica e/o Magistrale in Chimica;

Chimica Fisica (6 CFU, AA 2010/2011 e 2011/2012) per il Corso di Laurea in Scienze dei Beni e delle Attività Culturali (SBAC, mutuato inoltre come Chimica Fisica dell'Ambiente dal Corso di Laurea in Scienze Ambientali nell'AA 2010/2011);

Programmazione e Simulazione (3 CFU, AA 2012/2013, e AA 2013/2014 come **Programmazione e Modelli Molecolari**) all'interno del Corso di Laurea Triennale (L I livello) in Chimica e Chimica Industriale;

Chimica Fisica I - Modulo A (6 CFU, AA 2013/2014) all'interno del Corso di Laurea Triennale (L I livello) in Chimica e Chimica Industriale.

- Impegno didattico integrativo:

8. Tesi di Laurea/Tirocinio:

- AA 2010/2011: responsabile di Tirocinio per lo studente Christian Tantardini (20 ore)
- AA 2012/2013: responsabile di Tirocinio per lo studente Andrea Tagliabue (20 ore)
- AA 2016/2017: responsabile di Tesi di Laurea Magistrale per lo studente Andrea Tagliabue (100 ore)

9. Esami di Laurea:

- AA 2010/2011: Scienze dei Beni e delle Attività Culturali (10 ore);
- AA 2011/2012: Chimica e Chimica Industriale, Magistrale in Chimica, Scienze dei Beni e delle Attività Culturali (10 ore);
- AA 2012/2013: Chimica e Chimica Industriale, Magistrale in Chimica, Scienze dei Beni e delle Attività Culturali (5 ore);
- AA 2013/2014: Chimica e Chimica Industriale, Magistrale in Chimica (5 ore)

10. Attività di orientamento e tutoraggio:

- orientamento negli istituti superiori della Confederazione Elvetica (AA 2012/2013 e 2013/2014, 10 ore in totale);
- tutoraggio delle matricole del Corso di Laurea in Chimica e Chimica Industriale (AA 2012/2013 e 2013/2014, 10 ore/AA);
- tutoraggio degli studenti del Corso di Laurea in Scienze dei Beni e delle Attività Culturali a riguardo degli argomenti del Corso di Chimica Fisica (AA 2010/2011 e 2011/2012, 15 ore/AA);
- tutoraggio degli studenti del Corso di Laurea Specialistica in Chimica Industriale a riguardo degli argomenti del Corso di Programmazione e Simulazione (AA 2013/2014, 15 ore).

11. Sperimentazione di nuove modalità di insegnamento: modulo di **Abilità Informatiche di base** (2 CFU), raccolta informazioni sulle necessità di strumenti informatici funzionali alla didattica erogata da parte dei colleghi nel corso di Laurea in Chimica e Chimica Industriale, ideazione e stesura del programma, creazione di unità di lavoro autonomo per gli studenti, verifica apprendimento (AA 2012/2013 e 2013/2014, 40 ore/AA)

12. Assistenza ai Corsi, Esercitazioni e partecipazione Commissioni d'Esame:

- a. Programmazione e Simulazione: AA 2011/2012, Esercitazioni: 4 ore; Esami: 2 ore;
- b. Chimica Fisica Computazionale: AA 2011/2012, 2012/2013, e 2013/2014; Esercitazioni: 20 ore/AA; Esami: 20 ore/AA;
- c. Chimica Fisica degli Alimenti: AA 2012/2013; Esami: 4 ore.

Ottobre 2009-Dicembre 2010: ricopre il ruolo di **ricercatore** a contratto presso il Dipartimento di Scienze Chimiche ed Ambientali, Facoltà di Scienze MM. FF. NN., Università dell'Insubria, sede di Como (I). L'attività didattica e di ricerca è finanziata attraverso la procedura "**Rientro dei Cervelli**" (durata triennale);

- Impegno di Ricerca: sviluppo di metodi computazionali e modelli matematici per la descrizione del fenomeno di nucleazione e condensazione in fase gas, con applicazione alla nucleazione di nano particelle metalliche e di molecole polari (e.g. acqua ed ammoniaca) anche in presenza di specie nucleanti polari o cariche;
- Impegno didattico: incaricato del corso di Chimica Teorica, Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università dell'Insubria

Ottobre 2007-Settembre 2009: **Reader** in Theoretical Chemistry (equipollente a Professore Associato)

- Impegno didattico: Master in Science (MSc, equivalente a Laurea Magistrale) in "Molecular Modeling" e "Computing in the Physical Sciences", e MChem/BSc in Chemistry
 - a) Titolare degli Insegnamenti: "Quanto-mechanical Calculation of Molecular Properties" (26 ore/anno); "Fundamentals of Statistical Mechanics and Reaction Theory" (26 ore/anno); "Thermodynamics" (10 ore/anno); "Electron dynamics" (11 ore/anno); "From Microscopic to Macroscopic Phenomena" (11 ore/anno)
 - b) Relatore di tesi per studenti di BSc, MSc, e MChem (Lauree di I e II livello)
- Corsi monotelatici per studenti di Ph.D.: Termodinamica Statistica e Metodi di Simulazione Stocastici
- Gruppo di Ricerca in Chimica Teorica: composto da due studenti di Ph.D. (dottorandi) e da 1 studente di tesi a livello MSc
- Computing Representative per la School of Chemistry, Cardiff University
- Membro del comitato direttivo del Theoretical Chemistry Group (TCG), Royal Society of Chemistry. Lo scopo del TCG è di organizzare meeting e convegni su argomenti rilevanti per la Chimica Teorica ed agisce come referente per le necessità di finanziamento ed organizzazione dei gruppi di ricerca attivi UK attivi in questo ambito.
- Membro del comitato per l'acquisizione dei fondi necessari ad istituire un centro d'eccellenza per la formazione di dottorandi di ricerca (Doctorate Training Centre) in collaborazione con la School of Chemistry- University of Bristol.
- Lecturer nel workshop "Molecular Modeling for Chemists-MM4C", organizzato in collaborazione con la Royal Society of Chemistry ed Unilever

Maggio 1999-Settembre 2002: **Tecnico laureato** - Collaboratore elaborazione dati VII livello, Dipartimento di Chimica-Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano

Mansioni principali:

- Assistenza hardware e software
- Gestione tecnica dell'aula informatica per la didattica del Dipartimento
- Creazione e gestione del sito web del Dipartimento

Assistente alla ricerca della Sezione di Chimica Teorica, Computazionale e Spettroscopia del Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano. Correlatore di tesi di Laurea in Chimica Teorica e Computazionale

Settembre 1998: **Esercitatore** di Matematica per le matricole del Politecnico di Milano, sede di Como

Settembre 1997: **Esercitatore** di Matematica per le matricole del Politecnico di Milano, sede di Como

Reviewer per riviste scientifiche: Journal of Chemical Physics, Chemical Physics Letters, Journal of the American Chemical Society, Journal of Physical Chemistry A, Physical Review Letters, Physical Review A/B, Chemistry-An European Journal, European Journal of Physics D, Phys Chem Chem Phys, Journal of Molecular Graphics and Modelling, Environmental Science: Nano

Revisore di progetti scientifici per:

- 1) Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC)-UK

2) American Chemical Society-Petroleum Research Fund-USA

3) FIRB-MIUR

Workshop e Scuole

- Bologna 3-6 Giugno 2013: VI Corso Nazionale di Introduzione alla Fotochimica; Dipartimento di Chimica "G. Ciamician", Università degli Studi di Bologna
- Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry, NATO Advanced Study Institute
- Seminario Introduttivo alle Tecnologie Informatica in Chimica, Fondazione IBM Italia ed Università degli Studi di Perugia

Seminari e Presentazioni a Congressi (1997-)

[S=seminari ad invito; I=inviti a congressi e workshop internazionali]

Bologna (I, 25-28 Giugno 2018); XLVI CONGRESSO DELLA DIVISIONE DI CHIMICA FISICA, presentazione orale: "Weak polyelectrolytes in brine: effects of chemical specific interactions, topology, salt valency and concentration on conformations and $pK_a(\text{eff})$ "

Dublin (IR, 18-19 Settembre, 2017); 4th International Conference on Physical and Theoretical Chemistry, presentazione orale: "Recent advances in quantum monte carlo: Applications to lithium ion - stockmayer clusters, hydrogen isotopic separation, and the investigation of excited state manifolds"

Paestum (SA, 10-14 settembre 2017); XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, presentazione orale: "Killing bacteria via ion-complexing polymeric materials"

Paestum (SA, 10-14 settembre 2017); XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, presentazione orale: "Which reaction step controls regioselectivity in CuCl_2 -catalyzed cyclization of alkinyl-substituted ureas and carbamates?"

Paestum (SA, 10-14 settembre 2017); XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, presentazione orale: "The power of ligand combination in redox active ruthenium and iron complexes"

Paestum (SA, 10-14 settembre 2017); XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, presentation orale: "Should we Introduce Pre-Equilibria into Markov Models for Homogeneously Catalyzed Copolymerization?"

Milano - MIPOL2017 (15-01-2017/16-01-2017); Università degli Studi di Milano- presentazione orale: "Killing bacteria via ion-complexing insoluble polymers" (I)

Napoli (I), XLIV Congresso della Divisione di Chimica Fisica della SCI (20-09-2016/23-09-2016), presentazione orale: "Theoretical modeling of ethene/propene copolymerization: a quantum mechanical/stochastic approach to the microstructure of block-copolymers" (I)

12th European Congress on Catalysis - EuropaCat-XI, Kazan, Russia, 30 Agosto - 4 Settembre 2015, presentazione orale: "Insights on The Mechanism for the Transformation of Ethanol on Basic Oxides (Lebedev and Guerbet reactions)" (I)

Madrid 10-11 Ottobre 2014

BUILDING CLUSTERS IN ULTRA-COLD AND SUPERFLUID CONDITIONS: THE EFFECT OF FAST ENERGY DISSIPATION ON THE STRUCTURE AND ENERGETICS OF Au_n AND $(\text{NH}_3)_n$.

Workshop "Helium-mediated Synthesis, Soft-landing and Spectroscopy of Metal Nanoparticles on Surfaces", CSIC (I)

Alessandria 25 Giugno 2013 (I)

Investigating weaker hydrogen bonds: the case of frozen, quantum and $T > 0$ K ammonia clusters
XL Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Università del Piemonte Orientale

Durham (UK) 7-9 Gennaio 2013 (I)

Quantum Monte Carlo for molecular aggregates

Annual Meeting of the Spectroscopy and Dynamics Group - Royal Society of Chemistry

Toulouse (F) 24 Febbraio 2012 (S)

The queer amusement of theoreticians: investigating quantum phenomena in clusters.

Sheffield (GB) 13 Luglio 2009 (I)

Bridging the gap between Molecular Collision Events and Condensed Phases: Toward an atomistic approach to nucleation via Transition State Theory

CCP5 Molecular simulations Summer School, Department of Material Engineering, University of Sheffield

Barcellona 3 Novembre 2008 (S)

Bridging the gap between Molecular Collision Events and Condensed Phases:

Toward an atomistic approach to nucleation via Transition State Theory

ECM, Facultat de Fisiqua, Universitat de Barcellona

Bath (GB) 8 Aprile 2008 (S)

How accurate are statistical theories in predicting the rate constant for energized complexes? The prototypical case of H_5O_2^+

School of Chemistry, University of Bath

Cardiff (GB) 30 Gennaio 2008 (I)

Exploring isomerization/dissociation processes via molecular simulations: Applications to $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$

Faraday Division Symposium: "First principles computation of structure and dynamics", Cardiff University

Parigi (FR) 19 Novembre 2007 (S)

Statistical mechanics methods for the study of clusters containing excess protons

Laboratoire de Chimie Théorique-CNRS/Université Pierre et Marie Curie

Gainesville (PA) 13 Luglio 2007 (S)

The physical chemistry of protonated water clusters.

Department of Chemistry and Physics, Arcadia University

Como (I) 8 Giugno 2007 (S)

Protonated water clusters. The complicated nature of deceptively simple systems

Dipartimento di Scienze Chimiche ed Ambientali, Università dell'Insubria-Sede di Como

Milano (I) 12 Aprile 2007 (S)

Protonated water clusters. The complicated nature of deceptively simple systems

Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano

Birmingham (UK) 13 Dicembre 2006 (S)

Non-statistical effects in the internal dynamics of gas phase ligand exchanges: Are we in need of better theories?

Supporting lecturer in the RSC-Boys-Rahman Lecture Series, School of Chemistry, University of Birmingham, Birmingham (UK)

Roma (I) 25-26 Novembre 2006 (I)

Cyberinfrastructure of the quantum Monte Carlo scene: present and future of quantum statistical simulations for molecules and larger aggregates

ESF-Forward Look Seminar series, Accademia Nazionale dei Lincei, Rome (I)

Bristol (UK) 13 Ottobre 2006 (S)

Protonated Water Clusters $(\text{H}_2\text{O})_n\text{H}^+$ ($n=2-6$): The complicated nature of deceptively simple systems.

School of Chemistry, University of Bristol, Bristol (UK)

Nottingham (UK) 13-15 Settembre 2006 (S)

Protonated Water Clusters $(\text{H}_2\text{O})_n\text{H}^+$ ($n=2-6$): The complicated nature of deceptively simple systems.

Symposium for Recently Appointed Physical Chemists; School of Chemistry, University of Nottingham, and the Faraday Division of the Royal Society of Chemistry.

Nottingham (UK) 2-5 Aprile 2006 (I)

Quantum Monte Carlo methods for the accurate description of electron-positron correlation in square integrable and unbound states

Workshop “Electron-positron correlation”, Department of Physics, University of Nottingham, Nottingham (UK)

Sheffield (UK) 4 Gennaio 2006 (I)

Performance of model potentials vs ab initio calculations in describing protonated species: the case of the protonated water clusters $H^+(H_2O)_n$

Workshop “Simulations of water”, Engineering Materials Department, University of Sheffield, Sheffield (UK)

London (UK) 16 Novembre 2005 (S)

Quantum Monte Carlo approaches for the energetics, annihilation properties and scattering processes of positrons interacting with ordinary matter

Physics Department, University College London (UCL), London (UK)

Gaithesburg (MD) 25-29 Luglio 2005 (I)

Low energy mechanism of H/D isotopic exchange in the gas phase reaction between D_2O and $H^+(H_2O)_n$ ($n=2-6$)

6th Conference on gas phase kinetics, NIST

Lausanne (CH) 26 Agosto 2005 (S)

Quantum Monte Carlo methods: theory and selected applications on electronic structure and vibrational properties

LCBC-ISIC Ecole Polytechnique Federale de Lausanne

Viterbo (I) 25-30 Giugno 2005 (I)

Quantum Monte Carlo approaches to energetic, scattering, annihilation properties of positron and positronium containing systems

II “Electron and positron induced chemistry-EPIC” Meeting

Fribourg (CH) 17 Giugno 2005 (S)

The quantum Monte Carlo approach to the energetics, structure and spectroscopy of atomic doped He clusters

Department of Physics, University of Fribourg

Bad Honnef (DE) 27-30 Marzo 2005 (I)

Solvation and electronic excitation of atomic impurities in He clusters from a computational perspective

Workshop “Ultracold helium clusters“, Physik Zentrum, German Physics Society, Bad Honnef

Cape Town (ZA) 16-21 Gennaio 2005 (I)

Structure, Stability, and Conversion Mechanisms of Protonated Water Clusters $(H_2O)_nH^+$ including Quantum Effects and Anharmonicity

Watoc05 Conference

Philadelphia (USA) 22 -26 Agosto 2004 (I)

Energetics, structure, and excitation of atomic-doped helium clusters

228th Annual Meeting of the American Chemical Society, Pennsylvania Convention Center

Nottingham (UK) 27 Febbraio 2004 (S)

The ground state of protonated water clusters

Department of Physics and Astrophysics, University of Nottingham

Leicester (UK) 12 Novembre 2003(S)

Quantum Monte Carlo as a tool for atomic and molecular physical chemistry. A biased view of its development and applications.

Laboratory for Applied Mathematics, University of Leicester

Como (I) 13 Ottobre 2003 (S)

Anharmonic effects in protonated clusters

Istituto di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali, Universita' degli Studi dell'Insubria

New York (USA) 7-11 Settembre 2003 (I)

A DMC approach to study the structure and stability of small protonated water clusters
226th Annual Meeting of the American Chemical Society, Jarvits Conference Center

Minneapolis (USA) 17-19 Maggio 2003 (I)

Computing accurate forces in quantum Monte Carlo using Pulay's corrections and energy minimization
15th Electronic Structure Conference, Minnesota Supercomputing Institute, University of Minnesota

Philadelphia (USA) 15 Maggio 2003 (S)

A "shake'n'see" DMC approach to study the structure and stability of small protonated water clusters
Chemistry Department, University of Pennsylvania

Oxford (UK) 20 Gennaio 2003 (S)

Ground State and excitation dynamics of doped helium clusters
Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, University of Oxford

Ferrara (I) 31 Gennaio 2002 (S)

Mg solvation in He clusters: is it still an open problem?
Dipartimento di Chimica, Università di Ferrara

Roma (I) 27-28 Giugno 2001 (S)

Quantum Monte Carlo Study of Ag doped He clusters
Dipartimento di Chimica, Università La Sapienza di Roma

Wien (A) 18th Maggio 2001 (S)

Quantum Monte Carlo methods: flexible tools in Quantum Chemistry
Novartis NFI, Wien

Cambridge (USA) 12-14 Ottobre 2000 (I)

Computational challenges in positron Physical Chemistry
Workshop on "Positron and Positronium Interactions: New Directions"
ITAMP, Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics and Harvard Physics Department, Harvard University

Seattle (USA) 22-25 Settembre 1999 (I)

A quantum Monte Carlo approach to positron Chemistry
Workshop on "New Frontiers in quantum Monte Carlo: Fermions"
The University of Washington

Trento (I) 3-14 Febbraio 1997 (I)

Critical stability of neutral four-body systems
Workshop on "Critical Stability of Few-Body Quantum Systems", European Theory Center (ETC*), Trento

Pubblicazioni Scientifiche su Rivista (1994-presente)

1. **A quantum Monte Carlo simulation of the two dimensional H₂ molecule**
R. Bianchi, D. Bressanini, P. Cremaschi, M. Mella, G. Morosi
International Journal of Quantum Chemistry 50, 401 (1994)
2. **Wave-function Optimisation by Least-Squares fitting of the Exact Wave-function sampled by Quantum Monte Carlo**
R. Bianchi, D. Bressanini, P. Cremaschi, M. Mella, G. Morosi
International Journal of Quantum Chemistry 57, 321 (1994)
3. **Many-electron correlated exponential wavefunctions. A Quantum Monte Carlo application to H₂ and He²⁺**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
Chemical Physics Letters 240, 566-70 (1995)
4. **Stability of four-unit-charge systems: A Quantum Monte Carlo study**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
Phys. Rev. A 55, 200-205 (1997)
5. **An improved transition matrix for variational quantum Monte Carlo**
M. Mella, A. Luechow, and J. B. Anderson
Chem. Phys. Lett. 265, 467-472 (1997)

6. **Nonadiabatic wavefunctions as linear expansions of correlated exponentials.
A Quantum Monte Carlo application to H_2^+ and Ps_2**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
Chem. Phys. Lett. 272, 370-375 (1997)
7. **Stability and positron annihilation of positronium hydride $L=0,1,2$ states: a Quantum Monte Carlo study**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
Phys. Rev. A 57, 1678-1685 (1998)
8. **Positronium chemistry by Quantum Monte Carlo. I. Positronium-first row atom complexes**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
J. Chem. Phys. 108, 4756-4760 (1998)
9. **Stability of four-body systems in 3D and 2D:
A Theoretical and Quantum Monte Carlo study of Biexciton molecules**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
Phys. Rev. A 57, 4956-4959 (1998)
10. **Positron Chemistry by Quantum Monte Carlo: II. Ground-state of positron-polar molecule complexes**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
J. Chem. Phys. 109, 1716-1720 (1998)
11. **Positronium Chemistry by Quantum Monte Carlo: III. Ground state of $[OH,Ps]$, $[CH,Ps]$, and $[NH_2,Ps]$ complexes**
D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
J. Chem. Phys. 109, 5931-5934 (1998)
12. **Positron and positronium Chemistry by Quantum Monte Carlo: IV. Can this method accurately compute observables beyond energy?**
M. Mella, G. Morosi, D. Bressanini
J. Chem. Phys. 111, 108-114 (1999)
13. **Linear expansions of correlated functions: a variational Monte Carlo case study**
L. Bertini, D. Bressanini, M. Mella, G. Morosi
Int. J. Quantum. Chem. 74, 23-33 (1999)
14. **Quantum Monte Carlo calculations of molecular electron affinities: first-row hydrides.**
G. Morosi, M. Mella, D. Bressanini
J. Chem. Phys. 111, 6755-6758 (1999)
15. **A spline approach to trial wave function for variational and diffusion Monte Carlo.**
D. Bressanini, G. Fabbri, M. Mella, G. Morosi
J. Chem. Phys. 111, 6230-37 (1999)
16. **Quantum Monte Carlo study of the H^- impurity in small helium clusters**
M. Casalegno, M. Mella, G. Morosi, D. Bressanini
J. Chem. Phys. 112, 69-76 (2000)
17. **Quantum Monte Carlo investigation of small 4He clusters with an 3He impurity**
D. Bressanini, M. Zavaglia, M. Mella, G. Morosi
J. Chem. Phys. 112, 717-22 (2000)
18. **Time step bias improvement in diffusion Monte Carlo simulations**
M. Mella, G. Morosi, D. Bressanini
Phys. Rev. E 61, 2050-2057 (2000)
19. **A diffusion Monte Carlo accurate interaction potential between H and PsH**
M. Mella, G. Morosi, D. Bressanini
J. Chem. Phys. 112, 1063-65 (2000)
20. **Reply to the Comment on: Positron and positronium Chemistry by Quantum Monte Carlo: IV. Can this method accurately compute observables beyond energy? [J. Chem. Phys. 111, 108 (1999)]**
M. Mella, G. Morosi, D. Bressanini
J. Chem. Phys. 112, 3928-29 (2000)
21. **Positron and positronium Chemistry by Quantum Monte Carlo: V. The ground state potential energy curve of e^+LiH**
M. Mella, G. Morosi, D. Bressanini
J. Chem. Phys. 113, 6154-59 (2000)
22. **Variational Monte Carlo calculation of dynamic multipole polarisabilities and van der Waals coefficients of the PsH system**
M. Mella, G. Morosi, D. Bressanini
Phys. Rev. A 63, 024503-024503-4 (2001)

23. **Explicitly correlated trial wave functions in quantum Monte Carlo calculations of excited state of Be and Be-**
L. Bertini, M. Mella, D. Bressanini, G. Morosi
J. Phys. B, 34, 257-66 (2001)
24. **Stability and Production of positron-diatomic molecule complexes**
M. Mella, D. Bressanini, G. Morosi
J. Chem. Phys. 114, 10579-82 (2001)
25. **Annihilation rate in positronic systems by quantum Monte Carlo: e^+LiH as a test case**
M. Mella, S. Chiesa, and G. Morosi
J. Chem. Phys. 116, 2852-62 (2002)
26. **Robust wave function optimisation procedure in quantum Monte Carlo methods**
D. Bressanini, G. Morosi, and M. Mella
J. Chem. Phys. 116, 5345-50 (2002)
27. **Positron and positronium Chemistry by quantum Monte Carlo. VI. The ground state of LiPs, NaPs, e^+Be , and e^+Mg .**
M. Mella, M. Casalegno, and G. Morosi
J. Chem. Phys. 117, 1450-56 (2002).
28. **Stability of few-body systems and quantum Monte-Carlo methods.**
D. Bressanini, G. Morosi, L. Bertini, and M. Mella.
Few-Body Syst. 31, 199-204 (2002).
29. **o-Positronium scattering off H and He**
S. Chiesa, M. Mella, and G. Morosi
Phys. Rev. A. 66, 042502-042502-8 (2002).
30. **Ground state and excitation dynamics in Ag doped helium clusters**
M. Mella, M. C. Colombo, and G. Morosi
J. Chem. Phys. 117, 9695-702 (2002).
31. **Computing accurate forces in quantum Monte Carlo using Pulay's correction and energy minimisation**
M. Casalegno, M. Mella, and A. M. Rappe
J. Chem. Phys. 118, 7193-201 (2003).
32. **Three-fragment counterpoise correction of potential energy curves for proton transfer reactions.**
Alessandro Ponti and Massimo Mella
J. Phys. Chem. A. 107, 7589 (2003).
33. **Comparison of different propagators in diffusion Monte Carlo simulations of noble gas clusters**
Simone Chiesa, Massimo Mella, Gabriele Morosi, and Dario Bressanini
J. Chem. Phys. 119, 5601 (2003).
34. **Intermolecular forces and fixed-node diffusion Monte Carlo. A brute force test of accuracies for He_2 and $He-LiH$.**
Massimo Mella and James B. Anderson
J. Chem. Phys. 119, 8225 (2003).
35. **Zero temperature quantum simulation of small protonated water clusters $(H_2O)_nH^+$ ($n=1-5$)**
Massimo Mella and David C. Clary
J. Chem. Phys. 119, 10048 (2003).
36. **Quantum Monte Carlo estimators for the positron-electron annihilation rate in bound and low-energy scattering states**
Simone Chiesa, Massimo Mella, and Gabriele Morosi
Phys. Rev. A 69, 022701 (2004).
37. **Borromean binding in H_2 with Yukawa potential: A nonadiabatic quantum Monte Carlo study**
Luca Bertini, Massimo Mella, Dario Bressanini, and Gabriele Morosi
Phys. Rev. A 69, 042504 (2004).
38. **Improved importance sampling distribution for rate constant calculation**
Massimo Mella
J. Chem. Phys. 122, 204106 (2005).
39. **Nuclear Quantum Effects on the Structure and Energetics of $(H_2O)_6H^+$**
Massimo Mella, David C. Clary, Jer-Lai Kuo and Michael L Klein
Phys. Chem. Chem. Phys. 7, 2324 (2005).
40. **Electronic quantum Monte Carlo calculations of atomic forces, vibrations, and anharmonicities**
Myung Won Lee, Massimo Mella, and Andrew M. Rappe
J. Chem. Phys. 122, 244103 (2005)

41. **Predicting atomic dopant solvation in helium clusters: the MgHe_n case**
Massimo Mella, Gabriele Calderoni and Fausto Cargnoni
J. Chem. Phys. **123**, 054328 (2005)
42. **Alternative low energy mechanisms for isotopic exchange in the gas phase reaction between D_2O and $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=2-5$)**
Massimo Mella and Alessandro Ponti
ChemPhysChem, **7**, 894 (2006)
43. **Efficient calculation of low energy statistical rates for gas phase dissociation using umbrella sampling**
Massimo Mella
J. Chem. Phys. **124**, 104302 (2006)
44. **Study of the Structure, Energetics and Vibrational Properties of Small Ammonia Clusters $(\text{NH}_3)_n$ ($n=2-5$) Using Correlated *ab initio* Methods**
Paula E. Janeiro-Barral and Massimo Mella
J. Phys. Chem. A. **110**, 11244 (2006)
45. **Improved diffusion Monte Carlo propagators for bosonic systems using Itô calculus**
Pär Håkansson, Massimo Mella, Dario Bressanini, Gabriele Morosi and Marta Patrone
J. Chem. Phys. **125** 184106 (2006)
46. **Improved diffusion Monte Carlo for bosonic systems using time-step extrapolation "on the fly"**
Pär Håkansson and Massimo Mella
J. Chem. Phys. **126** 104106 (2007)
47. **Macroscopic evidences for non-RRK effects in the reaction between H_3O^+ and D_2O : the occurrence of non-statistical isotopic branching ratio**
Massimo Mella
J. Chem. Phys. **126** 104106 (2007)
48. **Application of valence-bond techniques to the study of weakly bound complexes. The potential energy surface of the Ne-CH_4 system.**
F. Cargnoni, M. Mella and M. Raimondi
Phys Chem Chem Phys **9**, 2457 (2007)
49. **Structure and energetics of ammonia clusters $(\text{NH}_3)_n$ ($n=3-20$) investigated using a rigid--polarizable model derived from {it ab initio} calculations**
Paula E. Janeiro Barral, Massimo Mella, and Emanuele Curotto
J. Phys. Chem. A **112** 2888 (2008)
50. **Importance sampling for quantum Monte Carlo in manifolds: Addressing the time scale problem in the simulation of molecular aggregates**
T. Luan, Emanuele Curotto, and Massimo Mella
J. Chem. Phys. **128**, 164102 (2008)
51. **Discretization error-free estimate of low temperature statistical dissociation rates in gas phase. Applications to Lennard--Jones clusters $\text{X}_{13-n}\text{Y}_n$ ($n=0-3$)**
Massimo Mella
J. Chem. Phys. **128**, 244515 (2008)
52. **Efficient and robust quantum Monte Carlo estimate of the total and spin electron densities at nuclei**
Pär Håkansson and Massimo Mella
J. Chem. Phys. **129**, 124101 (2008)
53. **Ground state potential energy surfaces and bound states of M-He dimers ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Au}$)**
R. J. Bartlett, F. Cargnoni, T. Kus and M. Mella
J. Chem. Phys. **129**, 204307 (2008)
54. **On possible simplifications in the theoretical description of gas phase atomic cluster dissociation**
Massimo Mella
J. Chem. Phys. **130**, 084108 (2009)
55. **Reactivity of a cationic alkyl amino-functionalized cyclopentadienyl aluminum compound with olefins: NMR observation and computational investigation of the single propene insertion product into an Al-C bond.**
D. Pappalardo, G. Milano, C. Pellecchia and M. Mella
Organometallics, **28**, 2554 (2009)
56. **Thermodynamic properties of ammonia clusters $(\text{NH}_3)_n$ $n=2-11$: Comparing classical and quantum simulation results for hydrogen bonded species**
C. Lubombo, E. Curotto, P. Janeiro Barral, and M. Mella
J. Chem. Phys. **131**, 034312 (2009)

57. **Effect of the angular momentum J of a cluster and of the orbital momentum L of the projectile on their collision probability**
M. Mella
J. Chem. Phys. **131**, 124309 (2009).
58. **Pathways for hydrogen bond switching in a tetrameric methanol clusters**
M. Mella and K. D. M. Harris
PhysChemChemPhys (2009)
59. **Structural properties of hydrophilic oligomeric chains bearing covalently-linked hydrophobic substituents: exploring the effects of chain length, fractional loading and hydrophobic interaction strength with coarse grained potentials and Monte Carlo simulations**
M. Mella and L. Izzo
Polymer **51**, 3582 (2010)
60. **Quantum Monte Carlo simulations of selected ammonia clusters (n=2-5): Isotope effects on the ground state of typical hydrogen bonded systems**
E. Curotto and M. Mella
J. Chem. Phys. **133**, 214301 (2010)
61. **Solubility of Metal Atoms in helium Droplets: Exploring the Effect of the Well Depth Using the Coinage metals Cu and Ag**
F. Cargnoni and M. Mella
J. Phys. Chem. A **115**, 7141 (2011).
62. **Sequential Growth Simulation of (NH₃)_n Clusters (n=2-8) in Ultracold Superfluid Environment**
M. Patrone and M. Mella
Chem. Phys. Lett. **514**, 16 (2011).
63. **Higher order diffusion Monte Carlo propagators for linear rotors as diffusion on a sphere: development and application to O₂@He_n**
M. Mella
J. Chem. Phys. **135**, 114504 (2011)
64. **Detection of relative dimer and rotamer concentrations of diacetamide in different solvents by FT-IR spectroscopy and DFT calculations**
S. Karabulut, H. Namli and M. Mella
Vibrational Spectroscopy **57**, 294 (2011)
65. **The Role of the Metal Center in the Ethylene Polymerization Promoted by Group 4 Complexes Supported by a tetradentate [OSSO]-Type Bis(phenolato) Ligand**
M. Mella, L. Izzo and C. Capacchione
ACS Catal. **1**, 1460 (2011)
66. **Modulating antimicrobial activity by synthesis: dendritic copolymers based on non-quaternized 2-(dimethylamino)ethyl methacrylate by Cu-mediated ATRP**
G. Vigliotta, M. Mella, D. Rega, L. Izzo
Biomacromolecules, **13**, 833 (2012)
67. **An analytical potential energy model for ammonia-H₂ from first principle**
J. P. Sheppelman, G. W. Smizaski, E. Curotto, Massimo Mella
Chem. Phys. Lett. **535**, 49 (2012)
68. **Exploring the importance of quantum effects in nucleation: the archetypical Ne_n case**
W. Unn-Toc, N. Halberstadt, C. Meier, and M. Mella
J. Chem. Phys. **137**, 014304 (2012)
69. **Exploring unvisited regions to investigate solution properties: the backyard of H₃O⁺ and its aggregates**
M. Mella
Chem. Phys. Lett. **555**, 51 (2013)
70. **Interpreting "Acidity" as a Global Property Controlling Comonomer Reactivity in Olefin Polymerization**
M. Mella and L. Izzo
Organometallics **32**, (2013)
71. **Quantum simulations of the hydrogen molecule on ammonia clusters**
M. Mella and E. Curotto
J. Chem. Phys. **139**, 124319 (2013)
72. **Coinage metal exciplexes with helium atoms: a theoretical study of the M^{*}(²L)He_n (M=Cu, Ag, Au; L=P,D)**
M. Mella and F. Cargnoni and A. Ponti
Phys. Chem. Chem. Phys. **15**, 18410 (2013)

73. **Replica exchange with Smart Monte Carlo and Hybrid Monte Carlo in manifolds**
R. Jenkins, E. Curotto and M. Mella
Chem. Phys. Lett. **590**, 214 (2013)
74. **Infinite swapping in curved spaces**
E. Curotto and M. Mella
J. Chem. Phys. **140**, 014103 (2014)
75. **Quantum Monte Carlo Methods for Constrained Systems**
S. Wolf, E. Curotto and M. Mella
Int. J. Quantum Chem. **114**, 611 (2014)
76. **Nucleation of quantized vortex rings in ^4He nanodroplets**
D. Mateo, A. Leal, A. Hernando, M. Barranco, Martí Pi, F. Cargnoni, M. Mella, X. Zhang, and M. Drabbels
J. Chem. Phys. **140**, 131101 (2014)
77. **Exciplexes with Ionic Dopants: Stability, Structure and Experimental Relevance of $M^+(^2P)^4\text{He}_n$ ($M=\text{Sr}, \text{Ba}$)**
M. Mella and F. Cargnoni
J. Phys. Chem. A **118**, 6473 (2014)
78. **Methanol as a clean and efficient H-transfer reactant for carbonyl reduction: Scope, limitations and reaction mechanism**
Thomas Pasini, Alice Lolli, Stefania Albonetti, Fabrizio Cavani and Massimo Mella
J. Catalysis **317**, 206 (2014)
79. **On the chemistry of ethanol on basic oxides: revising mechanisms and intermediates in Lebedev and Guerbet reactions**
Alessandro Chieragato, Juliana Velasquez Ochoa, Claudia Bandinelli, Giuseppe Fornasari, Fabrizio Cavani, Massimo Mella
ChemSusChem **8**, 377 (2015)
80. **Influence of charged intramolecular hydrogen bonds in weak polyelectrolytes: A Monte Carlo study of flexible and extendible polymeric chains in solution and near charged spheres**
M. Mella, L. Mollica, L. Izzo
J. Polymer Phys.: Part B **53** 650 (2015)
81. **The role of charge density and hydrophobicity on the biocidal properties of self-protonable polymeric materials**
S. Matrella, C. Vitiello, M. Mella, G. Vigliotta and L. Izzo
Macromolecular Bioscience **15**, 927 (2015)
82. **On the convergence of diffusion Monte Carlo in non-Euclidean spaces. I. Free diffusion**
E. Curotto and M. Mella
J. Chem. Phys. **142**, 114110 (2015)
83. **On the convergence of diffusion Monte Carlo in non-Euclidean spaces. II. Diffusion with sources and sinks**
E. Curotto and M. Mella
J. Chem. Phys. **142**, 114111 (2015)
84. **Replica exchange Hybrid Monte Carlo simulations of the ammonia dodecamer and hexadecamer**
J.G. Venditto, S. Wolf, E. Curotto, Massimo Mella
Chemical Physics Letters **635** 127-133 (2015)
85. **Vibrationally Inelastic Collision Between $\text{Li}_2(v = 0)$ and Li: Direct and Postponed Elongation Mechanisms**
Giorgina Corongiu and Massimo Mella
J. Phys. Chem. A **119**, 12954 (2015)
86. **Dynamics of photoexcited Ba^+ cations in ^4He nanodroplets**
Leal, A., Zhang, X., Barranco, M., Cargnoni, F., Hernando, A., Mateo, D., Mella, M., Drabbels, M., Pi, M.
J. Chem. Phys. **144**, 094302 (2016)
87. **Novel tiotolerant catalysts for the on-board partial dehydrogenation of jet fuels**
C. Lucarelli, C. Molinari, I. Jiménez Morales, E. Boanini, M. Mella, S. Albonetti, A. Vaccari
RSC Advances **6**, 48962 (2016)
88. **Novel hydrogen- and halogen-bonding anion receptors based on 3-iodopyridinium units**
Valeria Amendola, Greta Bergamaschi, Massimo Boiocchi, Nadia Fusco, Mario Vincenzo La Rocca,

- Laura Linati, Eliana Lo Presti, Massimo Mella, Pierangelo Metrangolo and Ana Miljkovica
RSC Advances **6**, 67540 (2016)
89. **Quest for Inexpensive Hydrogen Isotopic Fractionation: Do We Need 2D Quantum Confining in Porous Materials or Are Rough Surfaces Enough? The Case of Ammonia Nanoclusters**
Massimo Mella and E. Curotto
J. Phys. Chem. A **120**, 8148 (2016)
 90. **Investigating the Structural Features and Spectroscopic Properties of Bis(tetrazolato)-based Coordination Polymers**
Lavigna, Elisa; Xhaferaj, Nertil; Tabacaru, Aurel; Lamperti, Marco; Nardo, Luca; Mella, Massimo; Pettinari, Claudio; Galli, Simona
Crystal Growth & Design **16**, 6390 (2016)
 91. **Out of Equilibrium Self-Assembly of Janus Nanoparticles: Steering It from Disordered Amorphous to 2D Patterned Aggregates**
Andrea Tagliabue, Lorella Izzo, Massimo Mella
Langmuir **32**, 12934 (2016)
 92. **"Leaching or not Leaching": an Alternative Approach to Antimicrobial Materials via Copolymers Containing Crown Ethers as Active Groups**
M. De Rosa, G. Vigliotta, A. Soriente, V. Capaccio, G. Gorrasi, R. Adami, E. Reverchon, M. Mella, L. IZZO
Biomaterial Science **5**, 741 (2017)
 93. **Modulation of ionization and structural properties of weak polyelectrolytes due to 1D, 2D and 3D confinement**
M. Mella and L. Izzo
J. Pol. Sci. B: Pol. Phys. **55**, 1088 (2017)
 94. **An Assessment of the Effects of Anisotropic Interactions Among Hydrogen Molecules and Their Isotopologues: A Diffusion Monte Carlo Investigation of Gas Phase and Adsorbed Clusters**
M. Mella and E. Curotto
J. Phys. Chem. A **121**, 5005 (2017)
 95. **Dicopper(II) MozobilTM: a dinuclear receptor for the pyrophosphate anion in aqueous solution**
Valeria Amendola, Greta Bergamaschi, Leonardo Guglielmo, Lorella Izzo, Carlo Mangano, Massimo Mella, Chiara Milanese, Ana Miljković
Supramolecular Chemistry **29**, 834 (2017)
 96. **Impact of intermolecular drug-copolymer interactions on size and drug release kinetics from pH-responsive polymersomes**
Maria Chiara Barrella, Alessia Di Capua, Renata Adami, Ernesto Reverchon, Massimo Mella, Lorella IZZO
Supramolecular Chemistry **29**, 796 (2017)
 97. **Diffusion Monte Carlo simulations of gas phase and adsorbed D₂-(H₂)_n clusters**
E. Curotto, Massimo Mella
The Journal of Chemical Physics **148**, 102315 (2018),
 98. **Mg/Ga mixed-oxide catalysts for phenol methylation: Outstanding performance in 2,4,6-trimethylphenol synthesis with co-feeding of water**
Tommaso Tabanelli, Stefano Cocchi, Bianca Gumina, Lorella Izzo, Massimo Mella, Sauro Passeri, Fabrizio Cavani, Carlo Lucarelli, Jan Schutz, Werner Bonrath, Thomas Netscher
Applied Catalysis A, General **552** (2018) 86-97
 99. **On the Origin and Consequences of High DMAEMA Reactivity Ratio in ATRP Copolymerization with MMA: an Experimental and Theoretical Study**
Massimo Mella, M.V. La Rocca, Y. Miele, Lorella IZZO
J. Polymer Sci. Part A: Polymer Chemistry **56**, 1366 (2018)
 100. **A cascade mechanism for a simple reaction: the gas-phase methylation of phenol with methanol**
Tommaso Tabanelli; Sauro Passeri; Stefania Guidetti; Fabrizio Cavani; Carlo Lucarelli; Fausto Cargnoni; Massimo Mella
J. Catal. (2019) <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcat.2019.01.014>
 101. **Synthesis and spectroscopic characterization of 2-(het)aryl perimidine derivatives with enhanced fluorescence quantum yields**
Marco Lamperti, Arianna Maria Giani, Angelo Maspero, Guglielmo Vesco, Alessandro Cimino,

- Roberto Negri, Giovanni Battista, Giovenzana, Giovanni Palmisano, Massimo Mella, Luca Nardo
 J. Fluorescence (2019) <https://doi.org/10.1007/s10895-019-02361-9>
102. **Absorbed Weak Polyelectrolytes: Impact of Confinement, Topology, and Chemically Specific Interactions on Ionization, Conformation Free Energy, Counterion Condensation and Absorption Equilibrium**
 A. Tagliabue, L. Izzo, M. Mella
 Accepted for publication on J. Polymer Sci. (2019)
103. **Mechanistic insights into the catalytic transfer hydrogenation of furfural with methanol and alkaline earth oxides**
 Maria Gyngazova; Lorenzo Grazia; Alice Lolli; Giada Innocenti; Tommaso Tabanelli; Massimo Mella; Stefania Albonetti; Fabrizio Cavani
 J. Catal. **372**, 61 (2019)
104. **Hydrogen transfer activation via stabilization of coordinatively vacant sites: tuning long range π -system electronic interaction between Ru(0) and NHC pendants**
 Cesari, Cristiana; Mazzoni, Rita; Matteucci, Elia; Baschieri, Andrea; Sambri, Letizia; Mella, Massimo; Tagliabue, Andrea; Basile, Francesco; Lucarelli, Carlo
 Accepted for publication on Organometallics

Data

18/03/2019

Luogo

Como