

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera b) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, settore scientifico-disciplinare CHIM/02 - Chimica Fisica presso il Dipartimento di Chimica (avviso bando pubblicato sulla G.U. 23 del 20/03/2020). Codice concorso 4279.

RICCARDO CONTE

CURRICULUM VITAE

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

COGNOME	CONTE
NOME	RICCARDO
DATA DI NASCITA	03/04/1979

INDICATORI BIBLIOMETRICI

Numero totale di pubblicazioni su rivista	31
Capitoli di libro (Book Chapters)	1
Numero di pubblicazioni con <i>corresponding authorship</i>	16
Impact factor totale (sulla base dei valori più recenti disponibili - anno 2018):	114,69
Impact factor medio per pubblicazione su rivista (= impact factor totale / 31):	3,70
Numero totale di citazioni:	567 (google scholar); 476 (scopus)
Numero di citazioni medio per pubblicazione su rivista:	18,3 (google scholar); 15,3 (scopus)
h-index:	17 (google scholar); 15 (scopus)

LINEE DI RICERCA NELL'AMBITO DELLA CHIMICA FISICA TEORICA E COMPUTAZIONALE

Il mio interesse primario di ricerca riguarda lo studio teorico e computazionale di proprietà e processi chimico-fisici a livello molecolare. Nello specifico, mi occupo di creare e applicare nuove teorie e metodologie per studi spettroscopici e di scattering molecolare.

Nel primo caso l'attività di ricerca riguarda prevalentemente la dinamica semiclassica, attraverso lo sviluppo di propagatori e nuove teorie, e ha permesso di avanzare il campo fino ad arrivare a studiare a livello quantistico la spettroscopia vibrazionale di sistemi supra-molecolari, dirimendo controversie sperimentali. Nel secondo caso ho realizzato degli studi di scattering molecolare quasi-classico, che hanno permesso di chiarire processi di *energy transfer* e di investigare la possibilità di reattività selettiva inclusi meccanismi di *roaming*.

Per entrambe le tematiche la disponibilità di accurate superfici di energia potenziale è un pre-requisito fondamentale. Per questo motivo ho dedicato un'importante parte della mia attività di ricerca allo sviluppo di tecniche di fitting invariante per permutazione. I progressi ottenuti hanno permesso di risolvere dei problemi aperti nell'applicazione della tecnica, oltre a velocizzare i calcoli favorendo lo studio di sistemi a elevata dimensionalità.

Altri ambiti che ho trattato, prevalentemente durante il dottorato di ricerca e che integrano il mio profilo scientifico, riguardano la modellizzazione di cinetiche quantistiche e lo sviluppo del metodo dell'oscillatore forzato per la risoluzione del problema agli autovalori associato all'hamiltoniano elettronico di cluster metallici.

Gli interessi di ricerca futuri, nel breve e medio periodo, si concentreranno primariamente nello studio della spettroscopia vibrazionale di sistemi molecolari a elevata dimensionalità e nell'avanzamento del campo della spettroscopia semiclassica in fase condensata, un'area di ricerca ancora agli albori e poco sviluppata.

POSIZIONE ACCADEMICA ATTUALE

dal 02/10/2019 Ricercatore RTD-A presso il dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano.

TITOLI ACCADEMICI

- 11/09/2008 **Dottorato di ricerca in Chimica** (Chimica Teorica e Computazionale) - 70/70 e lode. Scuola Normale Superiore di Pisa (Italia).
Titolo della tesi: “*A dynamical approach to the calculation of thermal reaction rate constants*”. Advisor: Prof. G. P. Arrighini.
- 19/12/2003 **Diploma in Chimica** - 70/70 e lode. Scuola Normale Superiore di Pisa (Italia).
Titolo della dissertazione: “*Il modello di Bachelet-Bassani sviluppato per mezzo del metodo dell’oscillatore forzato*”.
- 21/10/2003 **Laurea in Chimica** - 110/110 e lode. Università di Pisa (Italia). Titolo della tesi: “*Il metodo dell’oscillatore forzato applicato allo studio di proprietà di cluster atomici*”. Relatore: Prof. G. P. Arrighini.

ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE

Abilitazione scientifica nazionale alle funzioni di professore di seconda fascia nel settore concorsuale 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE conseguita in data 31/07/2018.

ATTIVITÀ DIDATTICA

- Docente (CHIM/02) per il corso di Rational design and structural characterization of bioactive molecules, Università degli Studi di Milano. (da ottobre 2020, **24 ore** totali).
- Docente (CHIM/02) per il corso di metodi chimici per le biotecnologie, Università degli Studi di Milano. (da maggio 2020, **20 ore** totali).
- Co-docenza nell’ambito del corso di laboratorio di chimica fisica I, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (Docente: Prof. Cappelletti. 2019, **12 ore** totali).
- Lezioni e assistenza al corso di Laboratorio di Chimica Fisica A del Professor Ceotto, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (Dal 2016, **28 ore** totali).
- Lezioni nel corso di chimica quantistica del Professor Ceotto, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2016-2018, **6 ore** totali).
- Membro e assistente della commissione per l’esame del corso di chimica quantistica, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (dal 2016, **15 ore** totali).
- Membro esterno di una commissione di laurea magistrale in chimica, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (Anno 2018).
- Membro esterno di una commissione di laurea triennale in chimica, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (Anno 2016).
- Serie di *group meeting* presso il dipartimento di chimica della Emory University incentrati sullo *scattering* molecolare quasi-classico e sulle tecniche di *fitting* di superficie di energia potenziale che ho innovato e sviluppato. (2013-2015, **8 ore** totali).

PRECEDENTI INCARICHI DI RICERCA IN ITALIA E ALL'ESTERO

- 2015-2019 **Assegnista di Ricerca** (Chimica Teorica e Computazionale) per il progetto ERC "Semicomplex" del Prof. M. Ceotto. Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano (Italia). (3 anni e 11 mesi).
Linee principali di ricerca: Sviluppo di teorie nel campo della dinamica semiclassica; spettroscopia teorica.
- 2013-2015 **Postdoctoral Fellow** (Chimica Teorica e Computazionale) per il progetto DOE n. DE-FG02-97ER14782 del Prof. J. M. Bowman. Dipartimento di Chimica, Emory University, Atlanta (USA). (2 anni e 2 mesi).
Linee principali di ricerca: Dinamica e scattering molecolare quasi-classici; sviluppo di tecniche di fitting per superfici di energia potenziale.
- 2012-2013 **Collaboratore di Ricerca** (Chimica Teorica e Computazionale) del Prof. M. Ceotto.
Linee principali di ricerca: Dinamica semiclassica; spettroscopia teorica. (1 anno).
- 2009-2011 **Postdoctoral Fellow** (Chimica Teorica e Computazionale) nel gruppo del Prof. E. Pollak. Facoltà di Chimica, Weizmann Institute of Science, Rehovot (Israele). (2 anni e 11 mesi).
Linea principale di ricerca: Sviluppo del campo della dinamica semiclassica.
- 2010-2011 **Visiting Scholar** (Chimica Teorica e Computazionale) presso la Beijing Normal University, Pechino (Cina). Ospite del Prof. J. Shao, in missione dal Weizmann Institute of Science. (3 mesi)
Linea principale di ricerca: Dinamica semiclassica.
- 2007 **Borsa di Studio CNR** (Chimica Teorica e Computazionale) sotto la supervisione del Dott. Alessandro Fortunelli. IPCF, Pisa (Italia).
Linea principale di ricerca: Studio Computazionale di Aggregati Metallici. (3 mesi)

Inoltre, da dicembre 2015 a settembre 2019 incarico di **culture della materia** presso il dipartimento di chimica dell'Università degli Studi di Milano.

LISTA COMPLETA DELLE PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI PEER REVIEWED

* indica la *corresponding authorship*

32. **R. Conte***, C. Qu, P.L. Houston*, J. M. Bowman* "Efficient Generation of Permutationally Invariant Potential Energy Surfaces for Large Molecules" *J. Chem. Theory Comput.* ASAP doi: 10.1021/acs.jctc.0c00001 (2020).
31. **R. Conte***, G. Botti, M. Ceotto "Sensitivity of semiclassical vibrational spectroscopy to potential energy surface accuracy: A test on formaldehyde" *Vib. Spectrosc.* **106**, 103015 (2020).
30. **R. Conte**, M. Ceotto "Semiclassical Molecular Dynamics for Spectroscopic Calculations" *book chapter, in press, Wiley-VCH* (2020).
29. **R. Conte***, L. Parma, C. Aieta, A. Rognoni, M. Ceotto* "Improved semiclassical dynamics through adiabatic switching trajectory sampling" *J. Chem. Phys.* **151**, 214107 (2019).
28. **R. Conte***, F. Gabas, G. Botti, Y. Zhuang*, M. Ceotto* "Semiclassical Vibrational Spectroscopy with Hessian Databases", *J. Chem. Phys.* **150**, 244118 (2019).

27. M. Micciarelli*, F. Gabas, R. Conte, M. Ceotto* "An Effective Semiclassical Approach to IR Spectroscopy" *J. Chem. Phys.* **150**, 184113 (2019).
26. X. Ma, G. Di Liberto, R. Conte, W. L. Hase*, M. Ceotto* "A Quantum Mechanical Insight into SN2 Reactions: Semiclassical Initial Value Representation Calculations of the Vibrational Features of the Cl⁻ ... CH₃Cl Pre-reaction Complex with VENUS Suite of Codes", *J. Chem. Phys.* **149**, 164113 (2018).
25. F. Gabas, G. Di Liberto, R. Conte*, M. Ceotto* "Protonated Glycine Supramolecular Systems: The Need for Quantum Dynamics", *Chem. Sci.* **9**, 7894 (2018). Articolo scelto dalla rivista come 'Pick of the Week' e rappresentato sulla front cover del fascicolo.
24. M. Micciarelli*, R. Conte, J. Suarez, M. Ceotto* "Anharmonic Vibrational Eigenfunctions and Infrared Spectra from Semiclassical Molecular Dynamics", *J. Chem. Phys.* **149**, 064115 (2018).
23. G. Di Liberto, R. Conte, M. Ceotto* "`Divide-and-conquer` Semiclassical Molecular Dynamics: An Application to Water Clusters", *J. Chem. Phys.* **148**, 104302 (2018).
22. G. Di Liberto, R. Conte, M. Ceotto* "`Divide and Conquer` Semiclassical Molecular Dynamics: A Practical Method for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems", *J. Chem. Phys.* **148**, 014307 (2018).
21. M. Ceotto*, G. Di Liberto, R. Conte "Semiclassical "Divide-and-Conquer" Method for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems", *Phys. Rev. Lett.* **119**, 010401 (2017).
20. F. Gabas, R. Conte, M. Ceotto* "On-the-Fly ab Initio Semiclassical Calculation of Glycine Vibrational Spectrum", *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 2378 (2017).
19. P. L. Houston*, R. Conte*, J. M. Bowman* "Roaming Under the Microscope: Trajectory Study of Formaldehyde Dissociation", *J. Phys. Chem. A* **120**, 5103 (2016).
18. R. Conte*, P. L. Houston*, J. M. Bowman* "Trajectory and Model Studies of Collisions of Highly Excited Methane with Water Using an Ab Initio Potential", *J. Phys. Chem. A* **119**, 12304 (2015).
17. Z. Homayoon, R. Conte, C. Qu, J. M. Bowman* "Full-dimensional, High-level Ab Initio Potential Energy Surfaces for H₂(H₂O) and H₂(H₂O)₂ with Application to Hydrogen Clathrate Hydrates", *J. Chem. Phys.* **143**, 084302 (2015).
16. P. L. Houston*, R. Conte*, J. M. Bowman* "A Model For Energy Transfer in Collisions of Atoms with Highly Excited Molecules", *J. Phys. Chem. A* **119**, 4695 (2015).
15. R. Conte*, C. Qu, J. M. Bowman* "Permutationally-invariant Fitting of Many-body, Non-covalent Interactions with Application to Three-body Methane-water-water", *J. Chem. Theory Comput.* **11**, 1631 (2015).
14. C. Qu, R. Conte, P. L. Houston, J. M. Bowman* " 'Plug and play' full-dimensional ab initio potential energy and dipole moment surfaces and anharmonic vibrational analysis for CH₄-H₂O", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 8172 (2015).
13. P. L. Houston*, R. Conte, J. M. Bowman "Collisional Energy Transfer in Highly Excited Molecules", *J. Phys. Chem. A* **118**, 7758 (2014).
12. R. Conte*, P. L. Houston*, J. M. Bowman* "Trajectory Study of Energy Transfer and Unimolecular Dissociation of Highly Excited Allyl with Argon", *J. Phys. Chem. A* **118**, 7742 (2014).

11. D. Tamascelli, F. S. Dambrosio, **R. Conte**, M. Ceotto* "Graphics Processing Units Accelerated Semiclassical Initial Value Representation Molecular Dynamics", *J. Chem. Phys.* **140**, 174109 (2014).
10. **R. Conte***, P. L. Houston*, J. M. Bowman* "Communication: A benchmark-quality, full-dimensional ab initio potential energy surface for Ar-HOCO", *J. Chem. Phys.* **140**, 151101 (2014).
9. **R. Conte***, P. L. Houston*, J. M. Bowman* "Classical Trajectory Study of Energy Transfer in Collisions of Highly Excited Allyl Radical with Argon", *J. Phys. Chem. A* **117**, 14028 (2013).
8. **R. Conte**, A. Aspuru-Guzik, M. Ceotto* "Reproducing Deep Tunneling Splittings, Resonances, and Quantum Frequencies in Vibrational Spectra From a Handful of Direct Ab Initio Semiclassical Trajectories", *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 3407 (2013).
7. **R. Conte***, B. Fu, E. Kamarchik, J. M. Bowman* "A novel Gaussian Binning (1GB) analysis of vibrational state distributions in highly excited H₂O from reactive quenching of OH* by H₂", *J. Chem. Phys.* **139**, 044104 (2013).
6. A. Shalit, D. E. Lucchetta, L. Criante, F. Vita, J. R. Tasseva, F. Simoni, L. Franco, R. Bizzarri, P. Faraci, **R. Conte**, L. Viti, R. Kaner, R. Castagna* "Laser light polarization plastic visualizer: light scattering distribution and anisotropy", *RSC Adv.* **3**, 7677 (2013).
5. **R. Conte**, E. Pollak* "Continuum limit frozen Gaussian approximation for the reduced thermal density matrix of dissipative systems", *J. Chem. Phys.* **136**, 094101 (2012).
4. **R. Conte***, E. Pollak* "Comparison between different Gaussian series representations of the imaginary-time propagator", *Phys. Rev. E* **81**, 036704 (2010).
3. S. Olivier, **R. Conte**, A. Fortunelli* "Derivation of an empirical potential for gold with angular corrections", *Phys. Rev. B* **77**, 054104 (2008).
2. **R. Conte***, G. P. Arrighini, C. Guidotti "Direct evaluation via Forced Oscillator Method of the electronic state density of sizable clusters", *J. Comput. Chem.* **28**, 584 (2007).
1. **R. Conte***, G. P. Arrighini*, C. Guidotti* "Direct evaluation of the density of state of simple metal clusters via forced oscillator method (FOM): a preliminary report", *Chem. Phys. Lett.* **395**, 290 (2004).

PUBBLICAZIONI UNDER REVIEW

33. F. Gabas, **R. Conte**, M. Ceotto* "Semiclassical Vibrational Spectroscopy of Biological Molecules using Force Fields" *J. Chem. Theory Comput. under review.*

PUBBLICAZIONI IN PREPARATION

34. P.L. Houston, **R. Conte**, C. Qu, J.M. Bowman "Permutationally Invariant Polynomial Potential Energy Surfaces for Tropolone and H atom Tunneling Dynamics".
35. A. Rognoni, **R. Conte**, M. Ceotto "A quantum spectroscopic quest tells how many surrounding water molecules are needed for solvating the central one".

ARTICOLI DI DIVULGAZIONE SCIENTIFICA (TERZA MISSIONE)

1. C. Aieta, G. Di Liberto, F. Gabas, **R. Conte**, M. Ceotto "Chimica Teorica e Crescita Ecosostenibile: Un Viaggio a Bordo di un Nanomotore Guidato da Martin Karplus", *Nuova Energia* **2** (2016).

ATTIVITÀ DI REFERAGGIO PER RIVISTE SCIENTIFICHE

Review editor per la rivista *Frontiers in Chemistry*.

Attività di referaggio per *Journal of Molecular Spectroscopy*, *Journal of Physical Chemistry A*, *Journal of Chemical Physics*, *Journal of Chemical Information and Modeling*.

PRINCIPAL INVESTIGATOR E CO-PRINCIPAL INVESTIGATOR IN PROGETTI DI RICERCA

2017-
in corso **Co-Principal Investigator** (*Principal Investigator* Prof. Ceotto) per il progetto “QURE” del programma “FARE” del MIUR. Durata: 4 anni.

2018-19 **Principal Investigator** del progetto CINECA-ISCRA B “*Quantum Spectroscopy of Large Molecular and Supra-Molecular Systems (QUASP)*”. Durata: 1 anno. Pubblicazioni n. 24, 25, 28, 29 della lista pubblicazioni.

2016-17 **Principal Investigator** del progetto CINECA-ISCRA C “*On-the-fly Semiclassical Vibrational Spectrum of Glycine, with Benchmark of Charmm and Amber Force Fields (VIBROGLY)*”. Durata: 1 anno. Pubblicazioni n. 20, 21 della lista pubblicazioni.

PARTECIPAZIONE A GRUPPI DI RICERCA CON COLLABORAZIONI INTERNAZIONALI

2. Dal novembre 2015 membro del gruppo di ricerca coordinato dal Professor **M. Ceotto** presso il dipartimento di chimica dell’Università degli Studi di Milano per sviluppare il progetto ERC “Semicomplex”. Le collaborazioni internazionali includono:

- il Professor **Y. Zhuang** (Texas Tech University, Lubbock, Texas, USA) per la creazione di nuove metodologie per l’estensione della spettroscopia semiclassica a sistemi ad alta dimensionalità (Pubblicazione n. 28);

- il Professor **D. Marx** e il Dottor **R. Perez** (Ruhr Universitaet, Bochum, Germania) per studi di spettroscopia vibrazionale di sistemi supra-molecolari glicina-acqua (collaborazione in corso di svolgimento).

1. Tra il 2013 e il 2015 membro del gruppo di ricerca coordinato dal Professor **J. M. Bowman** presso il dipartimento di chimica della Emory University per sviluppare il progetto finanziato dal governo USA - Department of Energy (DOE, grant n. DE-FG02-97ER14782). Il progetto includeva collaborazioni con:

- il Professor **P. L. Houston** (Cornell University, Ithaca, USA) per modellizzazioni di *energy transfer* e simulazioni di *roaming* (Pubblicazioni n. 9, 10, 12, 13, 14, 16, 18, 19, 32);

- la Professoressa **B. Fu** (Dalian Institute, Dalian, Cina) per studi di analisi vibrazionale (Pubblicazione n. 7);

Un’ulteriore collaborazione internazionale, non legata a specifici progetti, ha coinvolto il Professor **A. Aspuru-Guzik** (University of Toronto, Canada) per uno studio di spettroscopia semiclassica (Pubblicazione n. 8).

In ambito nazionale le collaborazioni includono il Professor **D. Tamascelli** (Università degli Studi di Milano) per l’implementazione di codici semiclassici su architetture GPU (Pubblicazione n.11), e il Dr. **R. Castagna** (CNR-ISASI, Pozzuoli) per esperimenti di scattering (Pubblicazione n.6).

La rete di collaboratori, includendo i *group leader* degli incarichi post-dottorali conclusi, si estende quindi a USA (3), Italia (2), Europa (2), Cina (2), Israele (1), Canada (1).

ATTIVITÀ DI CORRELATORE DI TESI DI LAUREA E DOTTORATO

9. Correlatore della **tesi di laurea triennale in chimica** di *Cecilia Lanzi*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2020, in corso di svolgimento).
8. Correlatore della **tesi di dottorato in chimica** di *Alessandro Rognoni*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (da ottobre 2018, in corso di svolgimento. Pubblicazione no. 29).
7. Correlatore della **tesi di laurea magistrale in chimica** di *Giacomo Botti*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2018-2019. Pubblicazione n. 31).
6. Correlatore della **tesi di laurea triennale in chimica** di *Alessandro Fasan*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2018).
5. Correlatore della **tesi di laurea magistrale in chimica** di *Alessandro Rognoni*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2017-2018).
4. Correlatore delle **tesi di laurea magistrale in chimica** di *Lorenzo Parma*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2017-2018. Pubblicazione n. 29).
3. Correlatore della **tesi di laurea triennale in chimica** di *Giacomo Botti*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2017. Pubblicazione n. 28).
2. Correlatore delle **tesi di laurea triennale in chimica** di *Alessandro Rognoni*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2016).
1. Correlatore delle **tesi di laurea triennale in chimica** di *Lorenzo Parma*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2016).

Lo studente *Alessandro Rognoni*, dopo la tesi triennale, è stato 1 dei 6 studenti selezionati dalla Rochester University (Stati Uniti) - tra gli oltre 150 candidati di università di tutto il mondo - per il prestigioso programma di ricerca estivo della durata di 10 settimane "i-REU" dedicato a studenti *undergraduate* (2017).

ATTIVITÀ DI ASSISTENZA ALLA SUPERVISIONE DI STUDENTI DI DOTTORATO

Assistenza alla supervisione degli studenti di dottorato *Giovanni Di Liberto* e *Fabio Gabas*, dipartimento di chimica, Università degli Studi di Milano. (2015-2018) Pubblicazioni n. 20, 21, 22, 23, 25.

Assistenza alla supervisione dello studente di dottorato *Chen Qu* presso la Emory University (USA, 2013-2015). Pubblicazioni n. 14, 15, 17.

ATTIVITÀ DI RELATORE DI CONTRIBUTI ORALI A CONGRESSO E UNIVERSITÀ

9. **R. Conte**, G. Di Liberto, F. Gabas, M. Ceotto "*Semiclassical vibrational spectroscopy: The importance of quantum anharmonicity in supra-molecular systems*" (invited talk). AMOC 2018, Budapest, Ungheria (2018).
8. **R. Conte**, F. Gabas, G. Di Liberto, M. Ceotto "*Investigating molecular quantum vibrational frequencies with semiclassical dynamics: Theory and application to systems of astrochemical interest*" (contributed talk). Astro-Winter Modeling 2018, Bologna, Italia (2018).

7. **R. Conte**, F. Gabas, G. Di Liberto, M. Ceotto “*Investigating Molecular Vibrations with Semiclassical Dynamics*” (seminario). Dipartimento di Chimica e Biologia Molecolare, Università di Goteborg, Svezia (2017).
6. **R. Conte**, F. Gabas, M. Ceotto “*A semiclassical investigation of glycine vibrational frequencies*” (contributed talk). MolSimEng 2016, Politecnico di Milano, Milano, Italia (2016).
5. **R. Conte**, G. Di Liberto, F. Gabas, M. Ceotto “*Simulating Vibrational Spectra of Variously-sized Molecules via Multiple Coherent Time Averaging Semiclassical Initial Value Representation*” (contributed talk). CECAM workshop, Losanna, Svizzera (2016).
4. **R. Conte**, P. L. Houston, J. M. Bowman “*Study of Energy Transfer and Unimolecular Dissociation of Highly Excited Allyl with Argon*” (seminario). Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, Milano, Italia (2014).
3. **R. Conte**, P. L. Houston, J. M. Bowman “*QCT Study of Energy Transfer in Collisions of Highly Excited Allyl Radical with Argon*” (contributed talk). SERM-ACS meeting, Atlanta, Stati Uniti d’America (2013).
2. **R. Conte**, E. Pollak “*Frozen and Thawed Gaussian SCIVR of the imaginary-time propagator*” (seminario). Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, Milano, Italia (2011).
1. **R. Conte** “*An approximate route to the calculation of thermal reaction rate constants: Application to Eckart barriers*” (seminario). Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, Milano, Italia (2011).

Inoltre, co-autore di 11 contributi orali presentati da collaboratori a congresso e università. Relatori: Prof. M. Ceotto (7); Prof. J. M. Bowman (1); Dr. G. Di Liberto (2); Dr. F. Gabas (1).

POSTER PRESENTATI A CONGRESSO

7. **R. Conte**, F. Gabas, G. Di Liberto, M. Ceotto “*Semiclassical Dynamics: A Viable Route to Molecular Spectroscopy*”. MPC17 workshop, Pisa, Italia (2017).
6. **R. Conte**, P. L. Houston, J. M. Bowman “*Collisional Energy Transfer in Vibrationally Excited Molecules*”. SETCA annual meeting, Atlanta, Georgia, USA (2014).
5. **R. Conte**, P. L. Houston, J. M. Bowman “*QCT Study of Energy Transfer in Collisions of Highly Excited Allyl Radical with Argon*”. Symposium on Chemical Theory of Complex Systems, Atlanta, Georgia, USA (2014).
4. **R. Conte**, B. Fu, E. Kamarchik, J. M. Bowman “*A novel Gaussian Binning (1GB) analysis of vibrational state distributions in highly excited H₂O from reactive quenching of OH* by H₂*”. Conference on Dynamics of Molecular Collisions, Granlibakken, California, USA (2013).
3. **R. Conte**, A. Aspuru-Guzik, M. Ceotto “*Full-Dimensional Ammonia Vibrational Spectrum from a Handful of Classical Trajectories*”. SETCA annual meeting, Auburn, Alabama, USA (2013).
2. **R. Conte**, E. Pollak “*A comparison between different Gaussian series representations of the imaginary-time propagator*”. ACAM meeting, Dublin, Irlanda (2010).
1. **R. Conte**, et al. “*Nanopatterned oxide surfaces as templates for biological growth*”. 3rd symposium on theoretical biophysics, TheoBio-07, Cetraro, Italia (2007).

RICONOSCIMENTI PER L'ATTIVITÀ DI RICERCA

4. **Seal of Excellence** assegnatomi dalla Commissione Europea per il progetto Marie Curie Reintegration “Quantum Remediation - QURE”. Punteggio: 91.00/100. (Anno 2018).
3. **Seal of Excellence** assegnatomi dalla Commissione Europea per il progetto Marie Curie Reintegration “QURE”. Punteggio: 89.80/100. (Anno 2017).
2. **Inserimento in “Short list”** per una Junior Fellowship dell’Istituto per Studi Avanzati (FRIAS) dell’Università Albert-Ludwigs di Friburgo, Germania. La valutazione è stata effettuata da un comitato interno e da 2 esperti internazionali indipendenti. I criteri di valutazione hanno riguardato: 1) Eccellenza accademica del candidato; 2) Eccellenza del progetto proposto; 3) Esperienza e abilità del candidato. (Anno 2014).
1. **ACAM** (Atlantic Centre for Atomistic Modeling) **Fellowship** per presentare l’attività di ricerca a Dublino, Irlanda. (Anno 2010).

FINANZIAMENTI DERIVANTI DA PROGETTI, FELLOWSHIP E BORSE DI STUDIO

6. **350.000 standard cpu hours** sul cluster di calcolo Marconi, finanziati dal CINECA per il progetto IS CRA B “QUASP” di cui sono stato *Principal Investigator*.
5. Finanziamento pari a **182.340€** concesso dal MIUR nell’ambito del programma “FARE” per il progetto “QURE” di cui è *Principal Investigator* il Professor Ceotto. Nello spirito del *Seal of Excellence* assegnato ai miei Marie Curie Reintegration proposal, che invita a riutilizzare il progetto inviandolo ad altre agenzie di finanziamento, il mio ruolo è stato quello di ripensare e riscrivere il progetto Marie Curie originario adattandolo alle richieste del bando “FARE”. Attualmente ricopro il ruolo di *Co-PI* e coadiuvo il Professor Ceotto nello sviluppo del progetto. Parte dei fondi è stata sinora utilizzata per finanziare una borsa di dottorato e per i contratti di due collaboratori scientifici.
4. **62.500 standard cpu hours** sul cluster di calcolo Galileo, finanziati dal CINECA per il progetto IS CRA C “VIBROGLY” di cui sono stato *Principal Investigator*.
3. Fondi personali pari a circa **4500\$** associati all’incarico post-dottorale al Weizmann Institute of Science.
2. **300€** per la fellowship ACAM (Atlantic Centre for Atomistic Modelling).
1. Contributo pari a circa **4000€** associato alla posizione di studente ordinario alla Scuola Normale Superiore di Pisa.

PARTECIPAZIONE A SELEZIONI PUBBLICHE

6. **Vincitore** di una selezione per ricercatore RTD-A presso il dipartimento di chimica dell’Università degli Studi di Milano. (Anno 2019).
5. **Partecipazione** al colloquio orale per la selezione di un ricercatore RTD-A presso il dipartimento di chimica dell’Università degli Studi di Milano. (Anno 2017).
4. **Partecipazione** al colloquio orale per la selezione di un ricercatore RTD-A presso il dipartimento di chimica dell’Università degli Studi di Milano. (Anno 2016).
3. **Vincitore di borsa di studio** bandita dal CNR presso l’IPCF di Pisa. (Anno 2007).

2. **Vincitore di posto da studente ordinario** presso la Scuola Normale Superiore di Pisa, Italia. (Anno 1998. 1 dei 5 selezionati in chimica nell'anno 1998. Posizione mantenuta per l'intera durata quinquennale del corso ordinario).
1. **Vincitore di posto da studente ordinario** presso la Scuola Superiore di Studi Universitari e Perfezionamento Sant'Anna di Pisa, Italia. (Anno 1997, ingegneria, 1 degli 11 selezionati).

ALTRI PREMI E RICONOSCIMENTI

5. **Premiato per la 5a posizione** nella gara di semifinale italiana della sede di Milano, categoria GP, dei Campionati Internazionali di Giochi Matematici organizzati per l'Italia dal centro PRISTEM dell'Università Bocconi. Qualificato per la gara nazionale (42a posizione nella gara nazionale). (Anno 2019).
4. **Qualificato per la finale nazionale** delle Olimpiadi italiane di Matematica. (Anno 1997).
3. **Qualificato per la finale nazionale** delle Olimpiadi italiane di Fisica. (Anno 1997).
2. **Premiato per il 6o posto** nella competizione matematica "Mathesis" per studenti di scuola superiore organizzata dall'Università di Padova, Italia. (Anno 1997).
1. **Borsa di studio** del comune di Conegliano per gli studenti di scuola superiore più meritevoli. (Anno 1995).

COMPETENZE DI TIPO GESTIONALE/AMMINISTRATIVO

- All'interno del progetto ERC "SEMICOMPLEX" assistenza al *Principal Investigator* (Prof. M. Ceotto) nella fase di reclutamento di altri assegnisti di ricerca.
- Per il progetto ERC "SEMICOMPLEX" assistenza nell'espletamento del processo di acquisizione di un cluster di computer formato da 20 nodi cpu (64 Gb RAM/nodo, 20 cpu 2.6 GHz/nodo, per un totale di 400 core) più un nodo GPU. La procedura è consistita in una prima fase di scelta del tipo di macchine adatte per il progetto ERC, seguita da una fase di colloqui con potenziali venditori, e dalla preparazione del bando di gara pubblica.

PRINCIPALI COMPETENZE INFORMATICHE

- Programmazione: Fortran 77/90, shell scripting, basi di C, Mathematica, Perl.
- Software scientifici: MOLPRO, NWChem, Gaussian, Gromacs, vmd.
- Sistemi operativi: Linux, OsX.
- Calcolo parallelo: Open MPI.

COMPETENZE LINGUISTICHE

- Italiano: madrelingua;
- Inglese: livello C2 certificato dal Cambridge Assessment English nel febbraio 2019;
- Ebraico: frequentazione delle prime due classi del corso di lingua ebraica per stranieri presso il Weizmann Institute of Science (2009-2011, 120 ore totali.);
- Francese: scolastico.

Data

17/04/2020

Luogo

MILANO