

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera a) 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. n. 19 del 08/03/2022) Codice concorso 4958

Chiara Donatella Aieta

CURRICULUM VITAE

(N.B. IL CURRICULUM NON DEVE ECCEDERE LE 30 PAGINE E DEVE CONTENERE GLI ELEMENTI CHE IL CANDIDATO RITIENE UTILI AI FINI DELLA VALUTAZIONE.

LE VOCI INSERITE NEL FACSIMILE SONO A TITOLO PURAMENTE ESEMPLIFICATIVO E POSSONO ESSERE SOSTITUITE, MODIFICATE O INTEGRATE)

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

COGNOME	AIETA
NOME	CHIARA DONATELLA
DATA DI NASCITA	20/06/1988
POSIZIONE ATTUALE	Assegnista di ricerca presso il gruppo del Prof. M. Ceotto per il progetto ERC consolidator grant "SEMICOMPLEX", Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Milano.

TITOLI:**TITOLI DI STUDIO:**

- 27 febbraio 2014: **Laurea Magistrale in Scienze Chimiche**, Università degli Studi di Milano.
Valutazione: **110/110 con pieni voti assoluti e lode**.
Supervisore: Prof. MICHELE CEOTTO.
Titolo Tesi: "Parallelizzazione del Calcolo Semiclassico delle Costanti Cinetiche di Reazione in Presenza di Tunnelling".
- 18 ottobre 2010: **Laurea Triennale in Chimica**, Università degli Studi di Milano.
Valutazione: **110/110**.
Supervisore: Prof. MICHELE CEOTTO.
Titolo Tesi: "Studio Analitico e Computazionale dell'Effetto Tunnelling".

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA:

- 2 febbraio 2018: **Dottorato in CHIMICA**, Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Chimica.
Supervisore: Prof. MICHELE CEOTTO.
Titolo Tesi: "Quantum and Semiclassical Methods for Rate Constant Calculations".

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI (Totale: 4 anni e 5 mesi):

- 1 novembre 2021 - in corso (5 mesi): **assegno di ricerca** presso il gruppo del Prof. M. Ceotto per il progetto **ERC consolidator grant "SEMICOMPLEX"**, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano.
- 1 novembre 2019 - 31 ottobre 2021 (2 anni): **assegno di ricerca** presso il gruppo del Prof. M. Ceotto per il progetto **ERC consolidator grant "SEMICOMPLEX"**, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano.
- 1 novembre 2017 - 31 ottobre 2019 (2 anni): **assegno di ricerca** presso il gruppo del Prof. M. Ceotto per il progetto **ERC consolidator grant "SEMICOMPLEX"**, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano.

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO:

- **Progettazione e insegnamento** di un modulo di 8 ore sulla teoria dello stato di transizione con esercitazione al calcolatore e redazione della dispensa per il **corso "Laboratorio di Chimica Fisica A", laurea magistrale in Scienze Chimiche**, Università degli Studi di Milano, a.a. 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021 (totale di **40 ore erogate**).
- **Didattica integrativa - art. 45: esercitazioni** di termodinamica (**20 ore**) per il corso di **"Laboratorio di Chimica Fisica 1", laurea triennale in Chimica**, Università degli Studi di Milano, a.a. 2015/2016.
- Supervisione in qualità di **Correlatore di 2 tesi magistrali in Scienze Chimiche** (Studente: Giacomo Mandelli, a.a. 2019/2020; Studente: Alessandro Fasan, in corso) e di **1 tesi magistrale in Industrial Chemistry** (Studente: Ivan Ivanov Rozkov, a.a. 2020/2021). La tesi di G. Mandelli è risultata vincitrice del **premio Grazioli 2020**.
- Assistenza alla **supervisione di 1 tesi magistrale in Scienze Chimiche** (Studente: Stefano Americo, a.a. 2018/2019) e di **3 tesi triennali in Chimica** (Studente: Giovanna Bruno, a.a. 2014/2015; Studente: Stefano Americo a.a. 2016/2017; Studente: Alessandro Fasan, a.a. 2017/2018), Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano.
- 2015: Collaborazione occasionale presso Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano: **assistenza durante la "Summer School"** organizzata dal Dipartimento per gli studenti della scuola secondaria di secondo grado. Referente: Prof. M. Ceotto.
- 2014: Collaborazione occasionale presso Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano: **assistenza durante i laboratori di aggiornamento per gli insegnanti** della scuola secondaria di secondo grado presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano. Referenti: Prof. G. Cappelletti, Prof. L. M. Raimondi.
- 2014: Collaborazione occasionale presso Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano: **assistenza durante lo svolgimento dell'E-Chem test** per l'accesso alle lauree magistrali presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano. Referenti: prof. M. Ceotto, Prof. L. M. Raimondi.

DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI IN AGGIUNTA AI CONTRATTI DI ASSEGNO DI RICERCA:

- giugno 2017 - settembre 2017: **visiting Ph.D. Student** presso il gruppo del **Prof. G. Nyman, Università di Goteborg, Svezia.**
- 13-17/06/2016: **Partecipazione alla scuola** “Path Integral Quantum Mechanics: Theory, Simulation and Application”, CECAM-HQ-EPFL, Losanna, Svizzera.
- 25-29/01/2016: **Partecipazione alla scuola** “SMART Winter School (Space-time Multiscale Approaches for Research and Technology)”, CECAM-IT-SNS, Pisa, Italia.
- 10-14/02/2014: **Partecipazione alla scuola** “10th Advanced School on Parallel Computing”, CINECA, Bologna.
- 2019: **Frequenza del corso** (48h) “Teoria quantistica della computazione” presso il Dipartimento di Fisica dell’Università degli Studi di Milano.
- 2011-2012: **Frequenza a 5 corsi presso il Dipartimento di Fisica** in aggiunta ai corsi della laurea Magistrale in Chimica
 - “Laboratorio di Metodi Computazionali della Fisica” Programmazione ad oggetti in C++, Mathematica and Bash scripting.
 - “Laboratorio di Fisica Computazionale” Sviluppo di un software Mathematica che implementa un algoritmo genetico.
 - “Meccanica Analitica I”
 - “Meccanica Analitica II”
 - “Metodi Matematici della Fisica”
- 18-20/02/2013: **Partecipazione al corso** “Introduction to HPC Scientific programming: tools and techniques” presso CINECA, Segrate, Italia.
- 14-15/12/2010: **Partecipazione al corso** “Introduction to Scientific Programming using GPGPU and CUDA” presso CINECA, Segrate, Italia.

REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE:

- 2022: Progetto **Marie Curie Global Fellowship** “Post Born-Oppenheimer Approximation for Semiclassical Spectroscopy Investigation of Proton-Coupled Electron Transfer Processes - NEOSC”. **Punteggio: 91.20/100.**
- 2022: **PI del progetto** “Real Time Quantum Instanton reaction rates for symmetric and asymmetric potential energy surfaces (NewQI - HP10CNLSBB)” sul programma **ISCRA C** del CINECA. Durata 9 mesi. In fase di revisione.
- 2021: **PI del progetto** “Semiclassical Transition State Theory tunnelling rates for muonium reaction with propane (SemiMU - HP10CHDFFX)” sul programma **ISCRA C** del CINECA. Il progetto ha portato a 1 pubblicazione. Durata 9 mesi. Finanziato con 35k ore standard, **equivalenti a 5250EUR.**
- 2019: **PI del progetto** “Application of the Semiclassical Transition State Theory for rate constant calculations of heavy-atom tunneling chemical reactions (heavyTUN - HP10CWAQ6K)” sul programma **ISCRA C** del CINECA. Il progetto ha portato a 1 pubblicazione. Durata 9 mesi. Finanziato con 45k ore standard, **equivalenti a 6750EUR.**

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

- Dal 2017: **Membro del gruppo di ricerca** del Prof. M. Ceotto, Università degli Studi di Milano, per il progetto ERC Consolidator “SEMICOMPLEX”.
- 2017 (3 mesi): **Membro del gruppo di ricerca** del Prof. G. Nyman, Università di Goteborg, Svezia, in qualità di visiting Ph.D. student per integrare la tecnica Feynman-Kleinart nelle simulazioni semiclassiche del gruppo del prof. M. Ceotto.
- 2014 - 2017: **Membro del gruppo di ricerca** del Prof. M. Ceotto, Università degli Studi di Milano.
- Dal 2016: **Sviluppatore ufficiale** del pacchetto di codici **Multiwell** diretto dal Prof. J. R. Barker della University of Michigan. Ho sviluppato nuovi codici per il pacchetto, contribuito a migliorare e mantenere la suite, steso parte del manuale e interagito con gli utenti come user support.

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI:

- **Poster e Flash Talk** “Quantum nuclear densities from semiclassical on-the-fly molecular dynamics” al meeting “MolSimEng 2021”, Milano, 24/09/2021.
- **Talk** “Quantum nuclear densities from semiclassical on-the-fly molecular dynamics” al XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana SCI2021, 14-23/09/2021 (online).
- **Invited Speaker Talk** “Parallel Implementation of Semiclassical Transition State Theory and its Application to High-dimensional Tunneling Reactions” al XIXth International Workshop on Quantum Atomic and Molecular Tunneling Systems, Borovets, Bulgaria. (<http://qamts2019.phys.uni-sofia.bg>), 17-21/06/2019.
- **Talk** “A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants” al workshop “Different Routes to Quantum Molecular Dynamics”, CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland, 6-10/06/2016.
- **Poster** “A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants” al meeting “MolSimEng 2018”, Milano, 26/09/2018.
- **Poster** “A Quantum Method for Thermal Rate Constant Calculations from Stationary Phase Approximation of the Thermal Flux-flux Correlation Function Integral” alla conferenza “Swedish Theoretical Chemistry 2017 - Bridging gaps”, Gothenburg, Sweden 16-18/08/2017.
- **Poster** “A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants” al meeting “MolSimEng”, Milano, 30/09/2016.
- **Poster e selezione tramite peer-review per un flash talk** “A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants”, Faraday Discussion “Reaction Rate Theory: Faraday Discussion”, Cambridge, UK, 19-21/09/2016.
- **Poster** “A Quantum Approximate Method for the Calculation of Thermal Reaction Rate Constants” alla scuola “Path Integral Quantum Mechanics: Theory, Simulation and Application”, CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland, 13-17/06/2016.
- **Presentazione progetto** “Exact Quantum Dynamics” alla “SMART Winter School (Space-time Multiscale Approaches for Research and Technology)”, CECAM-IT-SNS, Pisa, 25-29/01/2016.
- **Coautore** di 10 interventi a congresso presentati da collaboratori.

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

- 2022: Inserimento in **reserve list** per il progetto **Marie Curie Global Fellowship “NEOSC”**. **Punteggio: 91.20/100. (Anno 2022)**. Nel caso il progetto non venga finanziato, verrà comunque assegnato il **riconoscimento del “Seal of Excellence” dalla Commissione Europea**. È stato espresso il seguente giudizio riguardo alla carriera scientifica:

“The researcher is very well qualified with a very good track record and CV (i.e. several contributions as 1st author and software development). The researcher has convincing experience in supervising students.”

- Dal 2019 **Cultore della Materia** presso il **Dipartimento di Chimica dell’Università degli Studi di Milano**.
- 2018: Rilascio della **certificazione di “Doctor Europaeus”**, aggiuntiva al titolo nazionale del dottorato.

PREMI E RICONOSCIMENTI OTTENUTI DA STUDENTI SUPERVISIONATI DURANTE IL LAVORO DI TESI:

- Il lavoro di tesi di G. Mandelli intitolato “Parallel and efficient implementation of anharmonic constants calculation for semiclassical reaction rates” da me supervisionato in qualità di Correlatore è risultato vincitore del premio Grazioli 2020 come migliore tesi di laurea magistrale. (Ammontare del premio: 2000EUR).

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

Dati Scopus aggiornati al 21/03/2022:

h-index: 7

Total Citations: 121

12) G. Botti, **C. Aieta**, R. Conte “The complex vibrational spectrum of proline explained through the adiabatically switched semiclassical initial value representation” Submitted to *J. Chem. Phys.*

11) G. Mandelli[†], **C. Aieta**[†], M. Ceotto “Heavy Atom Tunneling in Organic Reactions at Coupled Cluster Potential Accuracy with a Parallel Implementation of Anharmonic Constant Calculations and Semiclassical Transition State Theory” *J. Chem. Theory Comput.* (2022), **18**, 623-637. († **equal weight first authors**). (Cit. 0)

Selezionato come uno dei “Recent popular articles” dall’editorial office del Journal of Chemical Theory and Computation.

10) **C. Aieta**, G. Bertaina, M. Micciarelli, M. Ceotto “Representing molecular ground and excited vibrational eigenstates with nuclear densities obtained from semiclassical initial value representation molecular dynamics” *J. Chem. Phys.* **153**, (2020), 214117. (Cit. 5)

9) **C. Aieta**, M. Micciarelli, G. Bertaina, M. Ceotto, “Anharmonic quantum nuclear densities from full dimensional vibrational eigenfunctions with application to protonated glycine” *Nat. Commun.* **11**, (2020), 4348. (Cit. 10)

Pubblicazione inserita da Nature Communications nella raccolta “Editors’ Highlights pages”, sezione “Inorganic and physical chemistry”. Inoltre, è stato richiesto un articolo divulgativo per il blog “Nature Portfolio Chemistry Community”.

8) M. Gandolfi, A. Rognoni, **C. Aieta**, R. Conte, M. Ceotto “Machine learning for vibrational spectroscopy via divide-and-conquer semiclassical initial value representation molecular dynamics with application to N-methylacetamide” *J. Chem. Phys.* **153**, (2020), 204104. (Cit. 9)

- 7) R. Conte, L. Parma, **C. Aieta**, A. Rognoni, M. Ceotto "Improved semiclassical dynamics through adiabatic switching trajectory sampling" *J. Chem. Phys.* **151**, (2019), 214107. (Cit. 11)
- 6) **C. Aieta**, F. Gabas, and M. Ceotto "Parallel Implementation of Semiclassical Transition State Theory" *J. Chem. Theory Comput.* (2019), **15**, 2142-2153. (Cit. 4)
- 5) **PhD Thesis** "Quantum and Semiclassical Methods for Rate Constant Calculations", Università degli Studi di Milano, **C. Aieta**, 2018.
- 4) **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.*, (2017), **146**, 214115. (Cit. 10)
- 3) **C. Aieta**, F. Gabas, and M. Ceotto "An Efficient Computational Approach for the Calculation of the Vibrational Density of States" *J. Phys. Chem. A*, (2016), **120**, 4853-4862. (Cit. 16)
- 2) 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*, (2014), **118**, 24152-24164. (Cit. 42)
- 1) F. Spadavecchia, M. Ceotto, L. Lo Presti, **C. Aieta**, I. Biraghi, D. Meroni, S. Ardizzone and G. Cappelletti, "Second Generation Nitrogen doping of Titania Nanoparticles: a comprehensive electronic and microstructural picture" *Chin. J. Chem.*, (2014), **32**, 1195-1213. (Cit. 14)

SVILUPPO DI SOFTWARE SCIENTIFICO:

- 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-2021 Software Suite; J.R. Barker, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA, **2021**; <http://clasp-research.engin.umich.edu/multiwell/>, **sviluppatore ufficiale** dal 2016. (pacchetto citato 122 volte dal 2016 a oggi, dati ISI Web of Science, aggiornato al 25/10/2020)
- **C. Aieta**, G. Bertaina, M. Micciarelli, & M. Ceotto. (2020, September 23). Semiclassical Nuclear Density (Version v1.0). Zenodo. <http://doi.org/10.5281/zenodo.4046872>

ATTIVITÀ DI TERZA MISSIONE:

- Realizzazione di materiale di supporto per studenti della scuole secondaria superiore in occasione della Nobel Lecture di Martin Karplus presso l'Università degli Studi di Milano l'8 aprile 2016. Il documento intitolato "**Introduzione alla lezione del premio Nobel Martin Karplus**", presenta l'attività scientifica di Martin Karplus e descrive in modo semplice ma rigoroso l'importanza della dinamica molecolare.
- Pubblicazione di un articolo di divulgazione: **C. Aieta**, G. Di Liberto, F. Gabas, R. Conte, and M. Ceotto "Viaggio a Bordo di un Nanomotore Guidato da Martin Karplus", *Nuova Energia* **2**, 88, (2016).
- Creazione di alcuni quesiti e coordinamento del **progetto PLS** del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano che ha previsto la creazione di un database di domande per un test di autovalutazione destinato agli studenti della scuola secondaria superiore, 2015-2017.

ATTIVITÀ ISTITUZIONALE:

- 2018-2020 - **Rappresentante** degli Assegnisti di ricerca in **Consiglio di Dipartimento** di Chimica, Università degli Studi di Milano.

COMPETENZE INFORMATICHE:

- Linguaggi di programmazione: Fortran 90/95 (VERY GOOD), C++ (GOOD), C (GOOD), Bash (GOOD), OpenMP (GOOD), MPI (VERY GOOD), CUDA (BASIC), Python (BASIC).
- Software scientifico: Mathematica (GOOD), Gaussian16 (VERY GOOD), NWChem (GOOD), Matlab (BASIC), MultiWell (VERY GOOD), VMD (VERY GOOD), VASP (BASIC), Molpro (BASIC).
- Tools: GNU Gprof (GOOD), Scalasca (BASIC), git (GOOD).

CONOSCENZE LINGUISTICHE:

- Lingua madre: Italiano.
- Inglese (livello C1).
- Francese (livello A2).

Data

Luogo