

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 - Chimica Fisica _____) presso il Dipartimento di _____ Chimica _____, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 14 del 19.02.2019) - Codice concorso 4010

Leonardo Lo Presti

CURRICULUM VITAE

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

COGNOME	LO PRESTI
NOME	LEONARDO
DATA DI NASCITA	28/06/1976

SOMMARIO:

Indicatori generali.....	pag 2
1. Attività di ricerca e pubblicazioni scientifiche.....	pag 2
1a. Autonomia scientifica del candidato.....	pag 2
1b. Capacità di attrarre finanziamenti competitivi.....	pag 4
1c. Coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali.....	pag 5
1d. Conseguitamento della titolarità di brevetti.....	pag 6
1e. Conseguitamento di premi e riconoscimenti per attività di ricerca.....	pag 6
1f. Partecipazione a congressi e convegni di interesse internazionale.....	pag 7
1g. Attività di valutazione in selezioni competitive nazionali e internazionali.....	pag 7
1h. Altre attività strettamente inerenti al lavoro di ricerca.....	pag 8
1h.1 Organizzazione di congressi internazionali.....	pag 8
1h.2 Attività di Revisore su invito per riviste scientifiche internazionali.....	pag 8
2. Attività di didattica, di didattica integrativa e di servizio agli studenti.....	pag 9
2a. Lezioni frontali.....	pag 9
2b. Assistenza in laboratorio.....	pag 10
2c. Attività di tutoraggio non disciplinare.....	pag 10
2d. Corsi di Dottorato.....	pag 10
2e. Dottorandi, Laureandi e Tirocinanti.....	pag 11
2f. Terza Missione e Orientamento.....	pag 11
3. Attività istituzionali, organizzative e di servizio.....	pag 12
3a. Partecipazione alle Commissioni Istruttorie.....	pag 12
3b. Altre attività istituzionali, organizzative e di servizio.....	pag 13
4. Altre informazioni.....	pag 13
Appendice.....	pag 14
a. Articoli scientifici	pag 14
b. Capitoli di libri.....	pag 20
c. Comunicazioni a congressi	pag 20
d. Poster.....	pag 22
e. Conference papers.....	pag 24
f. Lista e dettaglio dei progetti finanziati.....	pag 25
1. Finanziamenti per risorse di calcolo ad alte prestazioni.....	pag 25
2. Tempo-macchina presso grandi facilities.....	pag 26
3. Grant e riconoscimenti monetari	pag 29
4. Responsabilità di ricerche affidate da istituzioni pubbliche o private.....	pag 30

Indicatori generali

Researcher ID: K-4281-2012

ORCID: orcid.org/0000-0001-6361-477X

Profilo ResearchGate: https://www.researchgate.net/profile/Leonardo_Lo_Presti

Profilo Google Scholar: <https://scholar.google.it/citations?hl=it&user=8XpBy48AAAAJ>

Presa di servizio come Ricercatore Universitario (Dipartimento di Chimica): **01/09/2007**

Anno di pubblicazione del primo articolo: 2002

Da cui, attuale età accademica: **17 anni** (di cui **12 come personale strutturato**)

Numero di pubblicazioni indicizzate negli ultimi 5 anni (2014-2019): **39**

Numero totale di articoli (2002-2019): **68**

Capitoli di libro pubblicati: **2**

Indice H (numero di articoli citati H volte; totale, WoS): 17

Indice H (totale, Scopus): 17

Indice H (totale, Google Scholar): 18

Indice i-10 (numero di articoli citati più di 10 volte; totale, Google Scholar): 42

Indice i-10: (2014-2019, Google Scholar): 32

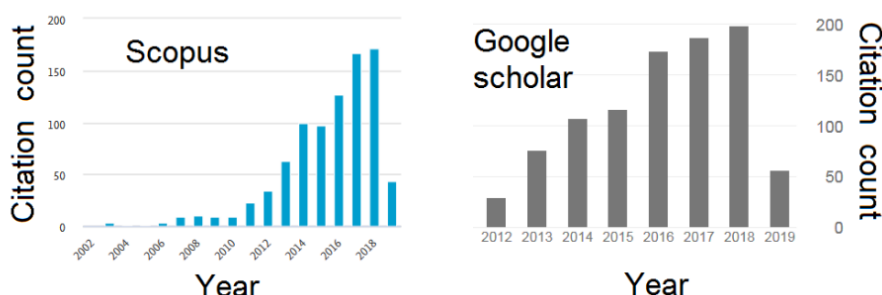
Citazioni totali (WoS): 825

Citazioni totali (Scopus): 874

Citazioni totali (Google Scholar): 1033

Numero medio di citazioni per articolo (totale, WoS): 12.49

Numero medio di citazioni per articolo (totale, Scopus): 12.84



Research Gate Score: 45.3 (> 97.5 % RG percentile)

1. Attività di ricerca e pubblicazioni scientifiche

1a. Autonomia scientifica del candidato

Laureato in Chimica presso l'Università degli Studi di Milano con 110/110 e lode nel 2000, ho intrapreso il percorso di dottorato in Scienze Chimiche (XVI ciclo, 2000-2003) su un progetto intitolato "*Densità elettronica e interazioni intermolecolari in cristalli organici: metodi e modelli*". Dal 2003 (novembre) al 2007 (agosto) ho vinto una posizione come assegnista di ricerca di tipo A (postdoc), rinnovata una volta, presso il Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica dell'Università degli Studi di Milano. Nel **2007** ho vinto un posto da **Ricercatore Universitario (RU)** all'Università degli Studi di Milano nel settore scientifico-disciplinare CHIM/02, con presa di servizio dall'1 settembre 2007. Come ricercatore sono entrato a far parte del gruppo di ricerca in Cristallografia (*XtalChem group*) del prof. Riccardo Destro, docente di ruolo nella stessa Università.

Inizialmente la mia attività di ricerca ha riguardato l'applicazione di tecniche avanzate di diffrazione di raggi X su cristallo singolo a bassa e bassissima temperatura (fino a 20 K) per

l'analisi nello spazio reale della densità elettronica in solidi molecolari. Nel corso degli anni, ho acquisito competenze di chimica computazionale nello stato solido (sia metodi quantistici, DFT e post-DFT, che classici - dinamica molecolare), diffrazione di raggi X su polveri e spettroscopia di assorbimento di raggi X (EXAFS), e i miei interessi di ricerca si sono orientati verso la **scienza dei materiali**, con particolare focus sul **riconoscimento molecolare** e le **relazioni struttura-proprietà**.

Dopo il pensionamento del prof. Destro (novembre 2013), **ho assunto la guida del gruppo**, che al momento (marzo 2019) comprende 2 tirocinanti, 2 laureandi e 2 dottorandi.

Nel corso degli ultimi 5 anni, ho stretto **collaborazioni** con diversi gruppi di ricerca in Italia e all'estero, come testimoniato da pubblicazioni e/o richieste di finanziamento comuni, e dalle mie affiliazioni a centri di ricerca nazionali e internazionali (punto 1.c, pagina 5). Di particolare rilevanza sono le seguenti:

- **Centro di Cristallografia dei Materiali di Århus (DK);**
- gruppo del prof. Aharon J. Agranat (fisico, Director of the Brojde Center for Innovative Engineering and Computer Science, **Hebrew University of Jerusalem**);
- gruppo della prof.ssa Simona Binetti (CHIM/02, **Università degli Studi di Milano-Bicocca**);
- Prof. Eugenio Del Re, FIS/03 (fisico, **Università degli Studi di Roma "La Sapienza"**);
- Prof. Massimo Moret (CHIM/03, **Università degli Studi di Milano-Bicocca**)
- Dr.ssa Domenica Marabello, CHIM/02, cristallografa presso l'**Università di Torino**;
- Dr. Arkady Ellern, cristallografo presso il Chemistry Department della **Iowa State University, USA**;
- Dr.ssa Lucia Silvestrini, BIO/11, biologa molecolare presso l'**University of Natural Resources and Life Sciences (BOKU - Vienna, Austria)** e da agosto 2018 *senior postdoc* presso l'Università Politecnica delle Marche;
- gruppo del Dr. Carlo Gatti (chimico teorico, CHIM/02) presso l'**Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari del CNR**;
- Prof.ssa Silvia Ardizzone (CHIM/02, **Università degli Studi di Milano**)
- Prof.ssa Silvia Rizzato (CHIM/03, cristallografa, **Università degli Studi di Milano**)
- Prof. Angelo Gavezzotti (CHIM/02, cristallografo computazionale, **Università degli Studi di Milano**)
- Prof. Michele Ceotto (CHIM/02, chimico teorico, **Università degli Studi di Milano**)
- vari beamline scientists (tra gli altri, Dr. Robert G. Acres, presso il **sincrotrone Elettra** a Trieste, e Dr. Paolo Longo e Dr. Mauro Coduri, presso il **sincrotrone ESRF** a Grenoble).
- Collaboro inoltre con vari gruppi di sintetisti chimici presso il **Dipartimento di Chimica** (Prof. Lesma, Prof. Passarella, Prof.ssa Bernardi, CHIM/06), il **Dipartimento di Scienze Farmaceutiche** (Prof. Conti, CHIM/08) e di **Scienze per gli Alimenti, la Nutrizione e l'Ambiente** (Prof. Pinto, CHIM/10) dell'**Università degli Studi di Milano**, fornendo assistenza nella determinazione della struttura molecolare tramite diffrazione di raggi X su cristallo singolo. Il mio contributo è stato determinante o per confermare la struttura di prodotti di sintesi, o per determinare la configurazione (assoluta o relativa) dei suoi centri stereogenici.

I miei **interessi di ricerca** riguardano le seguenti 3 tematiche.

- (i) Sviluppo di **teorie predittive dello stato solido** applicate a cristalli molecolari organici. Al momento i metodi di predizione delle strutture cristalline che hanno successo si basano su approcci tipo "forza-bruta": simulazione accurata di un gran numero di potenziali strutture e loro ranking in termini di energia relativa. Questa linea di ricerca ha invece l'ambizione di cercare correlazioni tra le proprietà termodinamiche dell'ensemble di molecole fuori dall'equilibrio, in procinto di cristallizzare, e la simmetria nel cristallo risultante. In altre parole intendo scoprire, se esistono, delle leggi generali che correlino *ab initio* la struttura molecolare e la corrispondente dinamica conformazionale alle strutture cristalline effettivamente

osservabili. In questo modo si potrebbero focalizzare i calcoli quantistici volti a predire accuratamente la struttura cristallina solo su un piccolo subset di probabili simmetrie, e non sull'intero insieme di 230 possibili gruppi spaziali. In questa linea uso tecniche di **Dinamica Molecolare** e **Monte Carlo** classiche per la simulazione di liquidi, soluzioni e nano-aggregati, accoppiate a tecniche statistiche di **data mining** applicate a **banche dati cristallografiche**, per studiare le correlazioni tra la struttura molecolare e l'impaccamento cristallino. Strettamente connesso a questo argomento è inoltre lo studio delle correlazioni tra densità elettronica e campo cristallino, ovvero come quest'ultimo, attraverso le interazioni non-covalenti, determina il **polimorfismo** e le **transizioni di fase solido-solido**.

- (ii) Studio di **antimalarici 4-amminochinolinici** quali inibitori della cristallizzazione della β -ematina, uno step cruciale dei processi biochimici del Plasmodio della malaria. L'idea del presente studio è di investigare come il farmaco 4-amminochinolinico interagisce col suo substrato, il gruppo eme, per progettare modificazioni chimiche atte a migliorare la sua attività.
- (iii) **Correlazioni struttura-proprietà in materiali avanzati**. Accoppiando tecniche sperimentali con luce di sincrotrone (diffrazione di raggi X da polveri, spettroscopia di assorbimento di raggi X) e computazionali (simulazioni quantistiche nel solido o di superfici) studio come l'interplay tra la struttura del materiale a varie scale di grandezza (composizione di fase, natura e distribuzione dei droganti, coordinazione locale dei centri metallici, struttura cristallina a lungo raggio) determina specifiche proprietà intensive osservate alla macroscale. Al momento mi sto occupando di: (a) fotocatalizzatori nanostrutturati a base TiO_2 per *environmental remediation* (in collaborazione col gruppo della prof.ssa Ardizzone, Milano). (b) Correlazioni tra struttura cristallina e proprietà ottiche non lineari in *metal-organic frameworks* con applicazioni teranostiche (in collaborazione col gruppo della Dr.ssa Marabello, Torino). (c) Correlazioni tra transizioni di fase strutturali e proprietà ferroelettriche in perovskiti di Ta/Nb per applicazioni fotoniche avanzate (in collaborazione con un team internazionale comprendente il prof. Aharon J. Agranat della Hebrew University of Jerusalem, il prof. Eugenio del Re dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", la prof.ssa Simona Binetti dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca e la Dr.ssa Raffaella Soave del CNR). In passato, mi sono anche occupato di materiali magnetoresistenti e perovskiti di terre rare con applicazioni come conduttori ionici.

Fino ad ora, ho prodotto **68 articoli** su riviste peer-reviewed con rilevanza internazionale, **2 capitoli di libri** e **più di 40 tra comunicazioni orali e poster a congressi nazionali e internazionali**. In 13 pubblicazioni sono **primo autore**, in 9 **secondo** e in 18 **ultimo**. Inoltre, sono **corresponding author** in **31 articoli** (il 46 %), e in più del 75 % delle mie pubblicazioni non è coinvolto il prof. Riccardo Destro (former group leader). L'elenco dettagliato delle pubblicazioni è riportato in Appendice del presente CV (pag. 14).

Ho conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore Universitario di seconda fascia per i Settori Scientifico-Disciplinari **03/A2 (MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, dal 10/04/2017 al 10/04/2023, bando 2016 primo quadrimestre)** e **03/B1 (FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI, dal 12/04/2017 al 12/04/2023, bando 2016 primo quadrimestre)**. Sto attualmente partecipando alla valutazione per il conseguimento dell'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di Professore di prima fascia per il Settore Scientifico-Disciplinare **03/A2**.

1b. Capacità di attrarre finanziamenti competitivi in qualità di responsabile di progetto

Ho vinto un totale di **12 tra finanziamenti competitivi nazionali e internazionali come PI** (su un totale di 18 progetti finanziati) per ottenere tempo macchina presso sorgenti di luce di sincrotrone / neutroni e risorse computazionali ad alte prestazioni. Tutti i progetti proposti sono stati valutati da esperti anonimi secondo le consuetudini della revisione tra pari. Si aggiungono

a questi **2 finanziamenti locali** nell'ambito del "Piano di Sviluppo di Ateneo" dell'Università degli Studi di Milano per il **potenziamento delle eccellenze scientifiche**. Ho inoltre partecipato ad un progetto finanziato **PUR 2008**, sono stato il PI di un **PUR 10 %** (2009) e nel 2018 ho vinto un grant relativo al Fondo di Finanziamento Annuale per le Attività Base della Ricerca (**FFABR**) del MIUR per selezione competitiva della qualità delle pubblicazioni scientifiche. Dei tutti i 23 progetti finanziati in cui io sono coinvolto a vario titolo, di **16 (≈ 70%) sono stato il Principal Investigator**. Nel complesso, ho ottenuto un totale di risorse per l'equivalente approssimativo di **≈ 660 k€**, di cui **≈ 32 k€** sotto forma di emolumenti monetari. A questi, si aggiungono le **5 borse di dottorato** attivate sotto la mia responsabilità e pagate dal Centro di Cristallografia dei Materiali di Århus attraverso il CNR (vedi Sezioni 1.c e 2.e). In Appendice (sezione f, pagina 25) è riportato l'elenco completo dei progetti finanziati, divisi per categoria.

Va inoltre sottolineato che **3/4 degli esperimenti** (9 su 12) effettuati presso grande facilities di luce di sincrotrone **hanno già prodotto pubblicazioni** (vedi Appendice, sezione f.2, pagina 26).

Inoltre, ho ottenuto circa **1000 € di compensi, interamente devoluti a fondi di ricerca**, per studi e ricerche scientifiche affidati da qualificate istituzioni pubbliche o private (riportati in Appendice, Sezione f.4).

Infine, negli ultimi 9 anni **ho attivamente partecipato a un totale di 8 bandi competitivi** regionali (CARIPLO 2014) e nazionali (PRIN 2010, 2013, 2015 e 2018, FIRB 2009, 2010 e 2012), ottenendo ottime valutazioni pur non essendo finanziato. A titolo di esempio:

Bando CARIPLO 2014 (Ricerca Biomedica Condotta da Giovani Ricercatori) RUOLO: PI. ("Although this is an interesting proposal, its focus is mainly pharmacological and therefore it does not fit to the call.[...] The applicant has an excellent track record to date, publishing in high impact journals. He also appears to be independent already, and would therefore benefit from funding to continue on his career path").

Bando PRIN 2015. RUOLO: PI. ("This is a well written and thought proposal. [...] Original is the idea to simulate and investigate the structural features in different aggregation states of the molecules, using state of the art techniques for both the experimental and theoretical analysis: the results will clarify at an unprecedented level of detail several important aspects of the intermolecular recognition process. Overall, previous scientific achievements of the applicants ensure the feasibility of the project. This project contributes to increase the knowledge in the specific field (computational, supramolecular and medical chemistry) and in other related sectors (biophysics, biochemistry and molecular medicine). The strategy of dissemination of the results is appropriate"). Valutazione: 12 punti su 15 (Criterio 1: Molto buona, Criterio 2: Ottima, Criterio 3: Eccellente).

1c. Organizzazione, direzione e coordinamento di centri o gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi e altre attività quali la direzione o la partecipazione a comitati editoriali di riviste scientifiche, l'appartenenza ad accademie scientifiche di riconosciuto prestigio

- (i) **Dal 2010 sono associato** (<http://chem.au.dk/forskning/forskningscentre/center-for-materials-crystallography/about-cmc/staff/>, vedi sotto "Partners") **al Center for Materials Crystallography (CMC) di Århus (DK)** guidato dal prof. Bo Brummerstedt Iversen. Il CMC è un centro internazionale di ricerca finanziato dalla Danish National Research Foundation, l'equivalente Danese del CNR Italiano. Insieme ai Dr. Carlo Gatti, Fausto Cargnoni e Davide Ceresoli del CNR-ISTM, partecipo al workgroup Milanese del Centro. La nostra attività riguarda lo sviluppo di metodi basati sulla densità elettronica per studiare il legame chimico, le interazioni non-covalenti e la struttura elettronica. L'obiettivo finale è di sviluppare una visione complessiva del panorama strutturale ed energetico dei motivi di impaccamento ricorrenti nei cristalli

organici, in modo da derivare suggerimenti sulla scelta di quali composti usare per sviluppare materiali organici con specifiche proprietà. Infine il CMC ha finanziato completamente le seguenti 5 borse di dottorato sotto la mia responsabilità presso la scuola di Dottorato in Chimica dell'Università degli Studi di Milano: Giovanna Bruno (ciclo XXXIV, 2019-2022), Francesca Menescardi (ciclo XXXIII, 2018-2021), Giovanni Macetti (ciclo XXXI, 2015-2018,,), Ahmed M. Orlando (ciclo XXVIII, 2012-2015), Gabriele Saleh (ciclo XXVI, 2010-2013).

- (ii) Nel periodo compreso tra il 25/03/2011 e il 25/11/2014 sono stato associato all'Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari (ISTM) del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR). Sono stato coinvolto in un progetto del Dipartimento di Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali con le seguenti specifiche (vedi anche http://www.cnr.it/commesse/Scheda_ModuloNuovo.html?id_mod=5564): Progetto PM.P07 (Modelling predittivo delle funzionalità in sistemi nanostrutturati di interesse biologico e tecnologico, 2006-2017); Commessa PM.07.002 (Nanoingegneria chimica computazionale e strutturale); Modulo PM.07.002.001 (Nanoingegneria chimica sperimentale e teorica: analisi di distribuzioni di densità elettronica con metodi computazionali innovativi e tecniche di diffrazione di raggi X ad alta risoluzione). La responsabile per questa ricerca era la Dr.ssa Raffaella Soave (r.soave@istm.cnr.it). I miei contributi hanno riguardato studi teorici e sperimentali della struttura cristallografica e del legame chimico di molecole organiche di interesse biologico e farmacologico. Mi sono anche occupato di problemi inerenti il polimorfismo di sostanze bioattive.
- (iii) A partire dallo scorso 22/07/2017 e fino a luglio 2019, sono nuovamente associato all'ISTM-CNR sotto la responsabilità del Dr. Carlo Gatti (c.gatti@istm.cnr.it) per un progetto dal titolo "*Studio sperimentale e teorico in fase condensata di materiali correlati di potenziale interesse chimico e tecnologico*" (DCM.AD002.122). A questo scopo, sto studiando con metodi sperimentali e teorici le relazioni struttura / proprietà in *metal-organic frameworks* luminescenti e in perovskiti di Nb/Ta utili per processi di conversione fotonica e / o come attuatori ferroelettrici.
- (iv) Dal 2007, sono membro dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC, <http://www.cristallografia.org/>), un'organizzazione no-profit che si propone di promuovere la cristallografia in Italia in tutti i suoi aspetti didattici e scientifici.
- (v) Sono attualmente Guest Editor per uno special issue della rivista open access "Crystals" (Impact Factor = 2.144) dedicato ai metodi di cristallizzazione in gel o in sistemi gel-like (http://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/Crystal_Growth_Gels).

1d. Conseguimento della titolarità di brevetti nei settori in cui è rilevante

Nessuno

1e. Conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca

- Da studente, esenzione al 100 % delle tasse universitarie per meriti curriculari.
- Vincitore di una borsa di studio di dottorato per la scuola in Chimica (2000-2003).
- Vincitore di un assegno di ricerca biennale, poi rinnovato una volta, presso il dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica dell'Università degli Studi di Milano (2003-2007).
- Premio Nazionale dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC) per la migliore tesi magistrale di argomento cristallografico: conferito nel 2015 ad una tesi sperimentale intitolata "*Experimental and Theoretical Study of the Mechanism of Action of the Antimalarial Drug Chloroquine*" presentata dal mio studente magistrale Giovanni Macetti. Questo lavoro di tesi ha prodotto in seguito due pubblicazioni scientifiche (DOI: 10.1088/0031-8949/91/2/023001; DOI: 10.1021/acs.cgd.6b01069).
- Premio Nazionale dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC) per la migliore tesi

magistrale di argomento cristallografico: conferito nel **2018** ad una tesi sperimentale intitolata “*Correlations among solubility and crystal structure: a crystallographic and spectroscopic study of the antimalarial drug piperazine*” presentata dal mio studente magistrale Pietro Sacchi. Questo lavoro di tesi ha prodotto una pubblicazione scientifica (DOI: 10.1021/acs.cgd.8b01794), e un'altra è attualmente in preparazione.

- Altri riconoscimenti:

Articoli su invito.

- o New Talent themed issue per **CrystEngComm**, **2018** (DOI: 10.1039/C8CE00674A)
- o Margaret C. (Peggy) Etter Virtual Memorial Issue per **Crystal Growth & Design**, **2016** (DOI: 10.1021/acs.cgd.5b00442).
- o Focus issue on Charge, Spin and Momentum Densities: SAGAMORE XVIII per **Physica Scripta**, **2016** (DOI: 10.1088/0031-8949/91/2/023001)

1f. Partecipazione in qualità di relatore a congressi e convegni di interesse internazionale

Ho al mio attivo **22 comunicazioni orali** a congressi e workshops internazionali, di cui **6 su invito**. In **7 talks** sono stato la **presenting person** e nelle altre **15 co-autore**. Ho infine presentato, o contribuito a, un totale di **24 poster**. Di tutti gli interventi a congressi, **5** sono stati pubblicati come “*Conference Papers*” in appendice a *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*. L'elenco completo delle comunicazioni a congressi è riportato in Appendice (Sezioni c, d, e, a partire da pagina 20).

1g. Attività di valutazione nell'ambito di procedure di selezione competitive nazionali e internazionali

- Iscritto al Registro digitale di esperti scientifici indipendenti per la valutazione scientifica della ricerca italiana del Miur (REPRISE).
- Nel Febbraio 2019 ho partecipato a una **procedura di selezione** per l'attribuzione di un **contratto di ricerca** (collaborazione coordinata e continuativa) pagato su fondi ERC (Consolidator grant) del prof. Michele Ceotto, da cui è risultato vincitore il Dr. Marco Cazzaniga (CHIM/02).
- Ottobre-Dicembre 2018. **Valutatore su invito** per uno **Stand-Alone project** (<https://www.fwf.ac.at/en/research-funding/fwf-programmes/stand-alone-projects/>) dell'**Austrian Science Fund (FWF)**. Valore del progetto: circa 400 k€.
- Ottobre-Dicembre 2017. **Valutatore su invito** per un grant “**Lise Meitner**” dell'**Austrian Science Fund (FWF)** (<https://www.fwf.ac.at/en/research-funding/fwf-programmes/meitner-programme/>) per la mobilità post-dottorale di ricercatori altamente qualificati che vogliano essere ospitati in istituzioni di ricerca austriaca. Valore del progetto: circa 150 k€.
- Attività di valutatore per **proposte di esperimenti di luce di sincrotrone**. Giugno 2017: X-ray/VUV Standard Proposal per **SLAC National Accelerator Laboratory** (Sincrotrone di Stanford).
- **Commissario** per il concorso di ammissione al **Dottorato di ricerca** in Chimica con **contratto di apprendistato in alta formazione e ricerca** (ciclo XXXII, 6 settembre 2016). Si è trattato del concorso per l'ammissione ad una borsa industriale, aperta a candidati internazionali, sulla linea di ricerca “*Nuovi processi sintetici per la preparazione industriale di principi attivi generici*”, svolto in collaborazione con Indena S.p.A.
- Marzo-Aprile 2013. **Valutatore su invito** di una proposta di finanziamento nell'ambito della cristallografia computazionale presentata alla **National Science Foundation (NSF, USA)**. Valore del progetto: circa 400 k\$.
- Dicembre 2008. **Commissario in una procedura di selezione** per l'affidamento a terzi estranei all'Università di incarichi a carattere intellettuale in riferimento all'attività di sorveglianza fisica della radioprotezione relativa all'impiego di apparati a raggi X, in seguito alla quale è stato riconosciuto vincitore il Dr. Daniele Fantinato.

- **Commissario per l'istituzione o il rinnovo di assegni di ricerca.** Negli ultimi anni, ho partecipato a **7 procedure di selezione** per l'attribuzione o il rinnovo di assegni di ricerca, dalle quali sono risultati vincitori i seguenti candidati: Dr. M. Coduri (CHIM/02), Dr.ssa F. Vasile (CHIM/06), Dr. R. Conte (CHIM/02), Dr. M. Micciarelli (CHIM/02), Dr.ssa C. Aieta (CHIM/02), Dr. Max Bucholz (CHIM/02), Dr. G. Bertaina (CHIM/02).

1h. Altre attività strettamente inerenti al lavoro di ricerca

1h.1 Organizzazione di congressi internazionali

- ICG2017 - Italian Crystal Growth Conference, Milano (Italy), 20-21/11/2017 (Co-chair) (<http://cristallografia.org/contenuto/icg2017--first-circular/2941>)
- SAGAMORE XVIII Conference on Charge, Spin and Momentum Densities, S. Margherita di Pula (CA), Italy, 7-12/06/2015 (Comitato organizzatore) (<http://www.sagamorexviii.org/>)
- ECDM-5 *European Charge Density Meeting*, Gravedona (CO), Italy, 6-11/06/2008 (Comitato organizzatore) (<http://ecdm5.istm.cnr.it/>)

1h.2 Attività di Revisore su invito per riviste scientifiche internazionali

Ho effettuato un totale di **92 revisioni**, comprensive di first submissions e resubmissions, di cui **più di 3/4 (76%)** su riviste di **elevato profilo**, appartenenti al 1° o al 2° quartile di fattore di impatto (dati Jurnal Citation Reports riferiti al 2017).

Rivista	Quartile	Settore	IF 2017 (5 yrs)	Reviews
Acta Crystallographica Section A	Q1	Crystallography	4.227	3
Acta Crystallographica Section B	Q1	Crystallography	6.171	3
Acta Crystallographica Section C	Q1	Crystallography	2.956	1
Advanced Materials	Q1	Materials Science	21.888	4
ACS Omega	Q1 ^(a)	Chemical Engineering (miscellaneous)	-	1
Catalysis Today	Q1	Chemistry, Physical	4.504	1
Chemistry - A European Journal	Q1	Chemistry, Multidisciplinary	4.950	3
Computational Materials Science	Q2	Materials Science, Multidisciplinary	2.575	1
Crystal Growth & Design	Q1	Crystallography	3.880	2
CrystEngComm	Q2	Crystallography	3.222	3
Dalton Transactions	Q1	Chemistry, Inorganic and Nuclear	3.872	2
Inorganic Chemistry	Q1	Inorganic Chemistry	4.513	1
International Journal of Quantum Chemistry	Q2	Physics, Atomic, Molecular & Chemical	1.867	2
Journal of Applied Crystallography	Q2	Chemistry, Multidisciplinary	4.332	1
Journal of Physical Chemistry C	Q1	Material Science, Multidisciplinary	4.691	13
Journal of Computational Chemistry	Q2	Chemistry, Multidisciplinary	4.161	1
Materials Chemistry and Physics	Q2	Materials Science, Multidisciplinary	2.296	6
Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)	Q1	Physics, Atomic, Molecular & Chemical	4.224	1
RSC Advances	Q2	Chemistry, Multidisciplinary	3.096	3
Solar Energy Materials and Solar Cells	Q1	Materials Science, Multidisciplinary	4.629	18

^(a) Dato preso da SCIMago

21 revisioni hanno riguardato *riviste di minor impatto*: Advanced Science Engineering and Medicine (ASEM), Chemical Physics Letters, Chemistry of Materials, Crystals, Journal of American Ceramic Society, Journal of Nanostructures in Chemistry, Journal of Molecular Structure, Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, Journal of Molecular Graphics and Modelling, Journal of Powder Diffraction, International Journal of Modern Physics B, Materials Chemistry Frontiers, Modern Physics Letters, Molecules, Physical Review and Research International, Research on Chemical Intermediates, Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie (ZAAC).

2. Attività di didattica, di didattica integrativa e di servizio agli studenti

2a. Lezioni frontali

Avendo svolto con continuità attività didattica in qualità di Ricercatore Universitario nei tre anni precedenti alla scadenza del presente bando, ho acquisito il titolo di **professore aggregato**.

- (1) 2008-attuale: Laurea Magistrale in Scienze Chimiche: **Cristallochimica** (6 CFU, corso opzionale). Le lezioni riguardano (i) teoria dei gruppi e rappresentazioni matriciali degli operatori di simmetria; (ii) teoria cinematica della diffrazione di raggi X; (iii) Principi di teoria della nucleazione e metodi di cristallizzazione, anche industriali; (iv) determinazione sperimentale della distribuzione della densità elettronica e (v) studio del legame chimico nello spazio reale attraverso la Teoria Quantistica degli Atomi nelle Molecole.
- (2) 2012-attuale. Laurea Triennale in Chimica: **Metodi chimico-fisici di indagine applicati a sistemi molecolari e nanostrutturati** (3 CFU, corso opzionale). Dal 2016, il corso fa parte della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche. Le mie lezioni riguardano (i) Introduzione alla scienza dei materiali; (ii) solidi cristallini e superfici; (iii) diffrazione di raggi X da polveri; (iv) diffrazione di elettroni da superfici; (v) microscopia a scansione: a effetto tunnel e a forza atomica; (vi) spettroscopia fotoelettronica (XPS).
- (3) 2016-attuale: Laurea Magistrale in inglese in Molecular Biotechnologies and Bioinformatics: **Rational design and structural characterization of bioactive molecules** (3 CFU, corso fondamentale). Le lezioni riguardano (i) richiami di termodinamica di base, (ii) teoria delle interazioni non-covalenti, (iii) metodi di meccanica e dinamica molecolare, (iv) principi di cristallografia.
- (4) 2014-2015: Laurea Magistrale in italiano in Biotechnologie Molecolari e Bioinformatica: **Metodi Chimici Avanzati Applicati alle Biotechnologie** (3 CFU, corso fondamentale). Le lezioni hanno riguardato: (i) Teoria delle interazioni non-covalenti; (ii) Meccanica molecolare; (iii) Introduzione alla spettrometria di massa; (iv) Introduzione alla diffrazione di raggi X.
- (5) 2008-2013: Laurea Magistrale in italiano in Biotechnologie Molecolari e Bioinformatica: **Metodi Matematici, Fisici e Chimici Applicati alle Biotechnologie** (3 CFU, corso fondamentale). Le lezioni hanno riguardato: (i) Teoria delle interazioni non-covalenti; (ii) Meccanica molecolare; (iii) Introduzione alla spettrometria di massa; (iv) Introduzione alla diffrazione di raggi X.
- (5) 2008-2010 Laurea Triennale in Scienze Biologiche: **Chimica Generale con Elementi di Chimica Fisica** (16 ore, corso fondamentale). Si è trattato di 1 CFU di lezioni di chimica fisica, sulla termodinamica dei sistemi all'equilibrio, con molti esercizi pratici.
- (6) 2005, primo semestre (da post-doc): **Assistenza didattica in aula a titolo gratuito** per il corso di "*Metodi chimico-fisici per lo studio della struttura di acidi nucleici e proteine*" della LM in Genomica Funzionale e Bioinformatica, tenuto dal prof. R. Destro (**12 ore**).
- (7) 2006, primo semestre (da post-doc): **Esercitazioni in aula a titolo gratuito** per il corso di '*Chimica Fisica (Cristallochimica)*' della LM in Scienze Chimiche, tenuto dal prof. R. Destro (**16 ore**), più assistenza ad esami (**4 ore**).
- (8) 2006, primo semestre (da post-doc): **Assistenza didattica in aula a titolo gratuito** per il corso di "*Metodi chimico-fisici per lo studio della struttura di acidi nucleici e proteine*" della LM in Genomica Funzionale e Bioinformatica, tenuto dal prof. R. Destro (**12 ore**).

Ho sempre effettuato didattica con continuità su argomenti inerenti alla cristallografia, alla scienza dei materiali e al molecular modelling. Va sottolineato che i corsi opzionali da me tenuti hanno usualmente una platea che va da 10 a 20 studenti, su un totale di circa 50 immatricolati al corso di laurea Magistrale in Scienze Chimiche, con ottime valutazioni. Riporto qui alcuni giudizi relativi alla mia attività didattica nel corso opzionale di "Cristallochimica". AA 2014-2015: "Il professor Lo Presti è estremamente chiaro durante l'esposizione degli argomenti trattati a lezione.

Ha una chiarezza in testa che ho visto solo in pochi professori. Ha la capacità di spiegare in modo semplice anche argomenti estremamente complessi permettendoti di apprezzare la vera bellezza della materia. Uno dei migliori professori che ho incontrato fino ad ora.” 2015-2016: “Il corso di Cristallografia è il più bello che abbia mai seguito. Se il Professor Lo Presti tenesse qualche corso fondamentale in triennale il numero di abbandoni a Chimica dimezzerebbe. Mai avuto un professore più chiaro e coinvolgente di lui. E lo dice una persona che ha iniziato a seguire il suo corso a tempo perso, a cui non è mai importato granché della cristallografia. Solo una cosa: grazie!”. 2016-2017: “Il corso è molto interessante e le lezioni sono state estremamente chiare, esaurienti e stimolanti. Il materiale didattico fornito è completo e facilita di molto la preparazione dell'esame agli studenti. Gli argomenti trattati, per quanto molto diversi tra loro, sono coerenti e forniscono globalmente una comprensione a tutto tondo della materia del corso.”

2b. Assistenza in laboratorio

(1) **2008-2010 e 2013-attuale:** Laurea Triennale in Chimica: Assistenza presso il **Laboratorio di Chimica Fisica 1** (termodinamica chimica, con esperienze riguardanti (i) determinazione della tensione di vapore di liquidi; (ii) bomba calorimetrica adiabatica; (iii) determinazione di costanti di equilibrio, attraverso tre diverse tecniche spettrofotometriche e una conduttimetrica).

(2) **2011-2012:** Laurea Triennale in Chimica: Assistenza presso il **Laboratorio di Chimica Fisica 2** (cinetica chimica, con esperienze riguardanti (i) cinetica enzimatica; (ii) bromurazione dell'acetone seguita per via spettrofotometrica; (iii) idrolisi acida dell'acetato di etile o di metile; (iv) idrolisi basica dell'acetato di etile o di metile).

(3) **2008-2010:** Laurea Magistrale in Scienze Chimiche: Assistenza presso il **Laboratorio di Chimica Fisica B** (sintesi e caratterizzazione di materiali in stato solido tramite diffrazione da polveri, microscopia elettronica, spettroscopia di impedenza e metodi termici).

2c. Attività di tutoraggio non disciplinare

Nei periodi 2010-2013 e 2017-attuale ho svolto, e sto tuttora svolgendo, attività di tutoring non disciplinare, seguendo due pool rispettivamente di 26 e 12 matricole dal primo anno di corso al conseguimento della laurea triennale.

2d. Corsi di Dottorato

- (1) dal 6 al 16 maggio 2013: **Coordinamento**, in collaborazione col prof. Michele Ceotto, del corso "*Taking a glance on ultrasmall and ultrafast worlds: time-resolved and free electron laser probes for chemical applications*" (PhD in Chemistry, 2 CFU)
 - 2 lectures (4 hrs): Dr. Leonardo Lo Presti, Università degli Studi di Milano;
 - 2 lectures (4 hrs): Prof. Michele Ceotto, Università degli Studi di Milano;
 - 2 lectures (4 hrs): Invited speaker: Prof. Jan Davidsson, Uppsala Universitet
- (2) 31 Marzo 2015: Lecture (2 hrs) su "*Diffraction and EXAFS methods*" per il corso "*Physical Chemistry of Nanosized Titania: first principles calculations vs. experiments*" (PhD in Chemistry, 2 CFU) coordinato dal prof. M. Ceotto e ospitante come visiting professor il prof. Nick Serpone, Università di Pavia
- (3) 25 Giugno 2015: Lecture (2 hrs) intitolata "*Encoding and decoding crystal structures*" per il corso "*From Molecules to Crystals*" (PhD in Chemistry, 2 CFU) coordinato dalla prof.ssa S. Rizzato e ospitante come visiting professor il prof. Massimo Moret, Università degli Studi di Milano-Bicocca
- (4) dal 30 maggio al 15 giugno 2017: **Coordinamento** del corso "*Discovering molecular recognition and self-assembling through the lenses of non-covalent interactions*" (PhD in Chemistry, 2 CFU)

- 2 lectures (4 hrs): Dr. Leonardo Lo Presti, Università degli Studi di Milano;
- 1 lecture (2 hrs): Dr. Stefano Pieraccini, Università degli Studi di Milano;
- 1 lecture (2 hrs): Dr. Alessandra Forni, CNR-ISTM
- 1 lecture (2 hrs): Prof. Giancarlo Terraneo, Politecnico di Milano

(5) dal 3 al 10 luglio 2019: **Coordinamento** del corso “*Making experiment and theory talking together: A multidisciplinary approach for materials science*” (PhD in Chemistry, 2 CFU)

- 1 lecture (2 hrs): Dr. Leonardo Lo Presti, Università degli Studi di Milano;
- 1 lecture (2 hrs): Prof. Marco Merlini, Università degli Studi di Milano;
- 1 lecture (2 hrs): Prof. Matteo Alvaro, Università degli Studi di Pavia;
- 1 lecture (2 hrs): Dr. Guido Sello, Università degli Studi di Milano;
- 1 lecture (2 hrs): Prof. Roberto Todeschini e Prof. Davide Ballabio, Università degli Studi di Milano-Bicocca

2e. Dottorandi, Laureandi, e Tirocinanti

- Nel periodo che va dal 2008 al 2019 sono, o sono stato, il relatore di **15 Tesi Magistrali** (G. Tusha, M. Frigerio, A. Sala, D. Rosa, P. Sacchi, A. Gionda, G. Finocchio, G. Buccella, G. Bruno, F. Beghi, G. Macetti, C. Tantardini, M. Sist, V. Pugliese, A. M. Orlando), **5 Tirocini Triennali** (L. Chiesa, F. Marinoni, P. Zaglio, M. Frigerio e M. Draghetti), e **correlatore di altre 5 tesi** (L. Laudato, G. Buccella, G. Diliberto - sia triennale che magistrale -, G. Bruno) tra studenti magistrali e tirocinanti triennali.
- Inoltre sono, o sono stato, **relatore di 5 studenti di Dottorato** della Scuola di Chimica (G. Bruno, ciclo XXXIV, al primo anno di corso; F. Menescardi, ciclo XXXIII, al secondo anno di corso; G. Macetti, ciclo XXXI; A. M. Orlando, ciclo XXVIII; G. Saleh, ciclo XXVI) e **correlatore di un sesto** (F. Beghi, ciclo XXXI). Sono anche subentrato come relatore di un **settimo** studente (S. Cenedese, ciclo XXIV), ma solo negli ultimi 6 mesi del suo percorso, in seguito al pensionamento del prof. Destro. Le borse di Bruno, Menescardi, Macetti, Orlando e Saleh sono state interamente finanziate dal Centro di Cristallografia dei Materiali di Århus in Danimarca, al quale sono associato (punto 1.c). Per quanto concerne il **career development** dei miei studenti, attualmente (marzo 2019) Saleh lavora presso l'Istituto Italiano di Tecnologia di Genova dopo un periodo di post-doc a Mosca presso i laboratori del prof. Artem Oganov, Macetti ha appena cominciato un post-doc all'Université de Lorraine (Nancy, FR) sotto la supervisione del Dr. Alessandro Genoni del CNRS e Orlando lavora in ambito industriale (quality assurance).

2f. Terza Missione e Orientamento

(1) 2011-2013. Su mandato della Commissione Orientamento, nell'ambito delle iniziative del **Progetto Lauree Scientifiche**, ho organizzato e coordinato il “**Laboratorio Energia**”. Tale laboratorio, tenuto sempre nel mese di febbraio (1 settimana), si propone di illustrare diverse strategie chimiche ed elettrochimiche per la conversione dell'energia solare in energia elettrica. Sono state coinvolte più di **10 scuole secondarie** per un totale di **quasi 400 studenti**.

(2) 2011-2014. Sempre nell'ambito del Progetto Lauree Scientifiche, ho contribuito a coordinare le esperienze di chimica fisica della **Summer School** interdisciplinare “**Marinella Ferrari**”, tenuta nella seconda settimana di giugno, per gli studenti delle scuole superiori.

(3) 13-14 marzo 2012: Allestimento di uno stand con dimostrazioni pratiche sulla conversione dell'energia presso l'**Acquario Civico di Milano**, in occasione dell'iniziativa “laboratori interattivi di chimica” organizzata nell'ambito de “L'Avventura della Scienza”.

(4) Febbraio-maggio 2014: Coordinamento, assieme alla Dr.ssa Valentina Colombo, dell'attività “**Cristalli**” nell'ambito dell'iniziativa “**Scienza Under 18**” rivolta agli studenti delle scuole medie superiori. Sono stati coinvolti circa **60 studenti**, che hanno assistito a dei seminari introduttivi presso il Dipartimento di Chimica. In seguito, sotto la supervisione dei loro docenti, i ragazzi hanno ottenuto cristalli di fosfato di ammonio tramite kit didattici da noi forniti, e

hanno infine presentato i risultati dei loro esperimenti in uno stand nel cortile d'onore dell'Università degli Studi di Milano (Via Festa del Perdono) in occasione della manifestazione *"Unimi Under 18"* (8-11 maggio 2014).

(5) 10 maggio 2014: Partecipazione alla manifestazione *"Unimi Under 18"* di cui al punto (4) e allestimento dello stand *"Cristalli"*.

(6) 12 giugno 2014: Organizzazione della cerimonia di presentazione della mostra *"Cristalli! in Unimi"* (vedi punto (7)).

(7) 12-29 giugno 2014. Allestimento e cura della mostra *"Cristalli! in Unimi"*, organizzata nell'ambito delle iniziative dell'Associazione Italiana di Cristallografia nel contesto delle celebrazioni per l'Anno Internazionale della Cristallografia.

(8) 28 novembre 2014. Seminario divulgativo *"Segnali dall'invisibile: una breve storia della diffrazione"*, presentato presso il Museo Civico di Storia Naturale di Milano col patrocinio del Gruppo Mineralogico Lombardo - Associazione Italiana di Mineralogia, sempre nell'ambito delle iniziative per l'Anno Internazionale della Cristallografia.

(9) 27 febbraio 2015: Seminario divulgativo *"Breve introduzione alla cristallografia"* nell'ambito del Progetto Lauree Scientifiche (PLS) (iniziativa *"Cristalli"* coordinata dalla Dr.ssa Valentina Colombo)

(10) 19 maggio 2017. Seminario divulgativo *"Segnali dall'invisibile: una breve storia della diffrazione"*, presentato presso l'Auditorium Levi a Milano nell'ambito della manifestazione PLS *"Onde, Minerali e Cristalli: Storia e Applicazioni"* durante la quale si è svolta la cerimonia di premiazione del 2° Concorso Nazionale Crescita Cristalli organizzato dall'Associazione Italiana di Cristallografia e rivolto alle Scuole Medie Superiori.

3. Attività istituzionali, organizzative e di servizio

3a Partecipazione alle Commissioni Istruttorie del Dipartimento di Chimica

- 2008-2009; 2013-attuale: **Membro del Collegio Docenti** della Scuola di Dottorato in Chimica.
Mansioni: Valutazione collegiale dei dottorandi, partecipazione agli esami finali di dottorato, organizzazione di corsi di dottorato, comprensivi dei seminari dei Visiting Professors, e relativi esami (vedi anche punto 2.d a pagina 10).
- 2018-attuale: **Membro della Commissione Didattica**
Mansioni: Sono membro della sottocommissione per il riordino dei corsi della LM in Industrial Chemistry e coordinatore della sottocommissione per il riordino dei corsi di stato solido CHIM/02 e CHIM/03. Sono inoltre coordinatore della sottocommissione per la progettazione di ausili agli studenti per la compilazione del Piano degli Studi.
- 2018-attuale: **Coordinatore della Commissione Strumentazione e Gas Tecnici.**
Mansioni: Da Ottobre 2018 ho assunto il ruolo di Coordinatore. Mi sto occupando, di concerto con la sede centrale, dell'istituzione degli accordi quadro per la fornitura di gas liquefatti e di gas tecnici pressurizzati, nonché dell'acquisto di nuove apparecchiature di interesse dipartimentale. Il Dipartimento di Chimica spende attualmente circa 32 k€/anno per i gas compressi, circa 39 k€/anno per l'azoto liquido e circa 13 k€/anno per l'elio liquido. Tali gas servono per il mantenimento in servizio di apparecchiature di ricerca che necessitano di un approvvigionamento continuo. Risulta quindi cruciale ottenere le condizioni economiche più favorevoli possibili, garantendo allo stesso tempo la qualità della fornitura.
- 2012-2018: **Membro della Commissione Strumentazione e Gas Tecnici.**
Mansioni: Partecipazione alle riunioni della Commissione e ai suoi lavori. Valutazione di offerte di forniture di gas tecnici e relativa impiantistica. Censimento della strumentazione in forze al Dipartimento. Contributo alla stesura del Regolamento del Servizio di

Spettrometria di Massa (SSM) dipartimentale.

- **2012-2016: Segretario della Commissione Paritetica Docenti-Studenti (CPDS).**
Mansioni: Stesura del verbale delle riunioni. Contributo alla stesura della Relazione Annuale della CPDS. In particolare, mi sono occupato di raccogliere dati statistici sullo stato occupazionale dei laureati chimici in Italia attraverso il rapporto Nazionale Unioncamere per contestualizzare i dati a disposizione della Commissione tramite i circuiti Vulcano e AlmaLaurea. Ho quindi proposto un format per la relazione, in cui i suddetti dati statistici venivano analizzati nell'Introduzione generale, che è stato poi adottato anche da altre Commissioni Paritetiche d'Ateneo.
- **2011-2015: Membro della Commissione Orientamento.**
Mansioni: Partecipazione alle riunioni della Commissione e ai suoi lavori. Stesura della relazione telematica - e relativa rendicontazione - delle attività relative al Progetto Lauree Scientifiche (PLS) sotto la mia responsabilità. Coordinamento di specifiche attività di orientamento descritte in dettaglio al punto 2.f (vedi sopra)

3b. Altre attività istituzionali, organizzative e di servizio

- **Docente di riferimento** per la Laurea Magistrale in Inglese in Molecular Biotechnologies and Bioinformatics del Dipartimento di Bioscienze dell'Università degli Studi di Milano
- **Rappresentante degli assegnisti di ricerca (2004-2007)** presso il Consiglio di Dipartimento del Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica (Università degli Studi di Milano).
- **Allestimento Open Day di Facoltà di Scienze MM FF NN**, 14 febbraio 2009
- **Commissario per i test di ammissione** alle lauree scientifiche della Facoltà di Scienze MM FF NN: 10 settembre 2012
- Organizzazione di due **seminari scientifici** (16/04/2013) in occasione dell'assegnazione del premio "Gregori Aminoff" per la Cristallografia del 2013: (i) "**Molecules in crystals**" tenuto dal **prof. Mark Spackman**, Head of School of Chemistry and Biochemistry, University of Western Australia; (ii) "**Challenging chemical concepts through charge density**" tenuto dal **Dr. Carlo Gatti**, primo ricercatore CNR-ISTM
- Dal 23/01/2017: **Responsabile radioisotopi/apparecchiature radiogene** dell'ex-Sezione di Chimica Fisica (4 diffrattometri a raggi X per cristallo singolo, numeri RX_8-11)
- **Partecipante al Focus-Group** ai fini della valutazione del **rischio stress lavoro-correlato** (14/06/2018) nell'ambito dell'indagine condotta dall'Ateneo nell'ultimo anno solare sulla qualità dell'ambiente lavorativo.
- **Presidente di commissione per i test di ammissione** alle lauree scientifiche della Facoltà di Scienze e Tecnologie: 11 settembre 2018
- Organizzazione di un **seminario scientifico** (28/01/2019) dal titolo "**Analysis of electric field lines to understand the electrostatic paradox of anion-anion and cation-cation aggregates**" tenuto dal **prof. Enrique Espinosa**, Université de Lorraine (FR).

4. Altre informazioni

Strutture pubblicate

Segue un elenco di 47 codici di **strutture molecolari da diffrazione** di raggi X su cristallo singolo da me pubblicate nel repository internazionale pubblico **Cambridge Structural Database** (www.ccdc.cam.ac.uk/structures).

BETQAV, BETQEZ, DCLBQN01, DCLBQN02, DCLBQN03, DEGYUL, DEGYUL01, EMONAW, GEXXAI01, GEXXAI02, HEXQOT, HEXQUZ, HEXRAG, HEXREK, HEXRIO, HEXROU, HIRGAS, HOXRES01, ISABIO, LICWUR, LOZYII01, LOZYII02, LOZYII03, MASKUM01, MASKUM02, MUMNOZ, OLATOM, OLATUS,

OLAVAA, PANGIX, PANGOD, QIKMAY01, QIKMAY02, QIKMAY03, QIKMAY04, QIKMAY05, QIKMAY06, UVIZAC, VUPSOQ, XIMLIP01, XUGTIE, XUGTOK, YIBGUO, YIBHAV, YIBHEZ, YOFSET, YOFSIX

1 struttura da raggi X su polveri da me pubblicata presso l'International Centre for Diffraction Data (ICDD, <http://www.icdd.com/>): vedi la seguente pubblicazione: doi: 10.1021/cg501074

Altre esperienze formative professionali

- **Settembre 2018:** Workshop (1 giorno) su “Crystallography and NMR in complementary structural investigations” (CHANCES, Firenze)
- **Ottobre 2015:** Corso di aggiornamento di 4 ore su “Uso in sicurezza di gas criogenici e compressi”, (SIAD, Milano).
- **Settembre 2015:** Workshop (1 giorno) su “Multivariate DOE and PCA Methods in Materials Science and Crystallography”, incontro satellite del 44th Meeting Annuale dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC), Università del Piemonte Orientale.
- **Novembre 2013:** Corso telematico (4 ore) su “Formazione generale dei lavoratori sulla sicurezza nei luoghi di lavoro”, AIFOS e-learning platform
- **Giugno 2013:** Conferenza (2 giorni) su “Passato, presente e futuro della cristallografia”, Politecnico di Milano
- **Settembre, 2007:** Workshop (4 giorni) su “XD2006 program package: Advanced Methods in X-ray Charge Density Analysis: Extracting Properties from a Multipole Refinement”, Associazione Italiana di Cristallografia (AIC)
- **Settembre 2006:** Scuola (6 giorni) su “Ab-initio modelling in solid state chemistry (MSSC 2006)”, Università di Torino
- **Settembre 2001:** Scuola (12 giorni) “VI National School of Synchrotron Light”, SILS (Società Italiana Luce di Sincrotrone)
- **Marzo-Maggio 1999:** Corso (16 ore) su “La qualità: aspetti regolatori di sistema e di controllo di prodotto/processo” Associazione EURESIS (col patrocinio di CERTICHIM).

Appendice

a. **Articoli scientifici.** (*) indica l'autore, o gli autori, corrispondenti. Per ogni record, sono indicati l'Impact Factor ed il quartile della rivista (con riferimento all'anno di pubblicazione, o al 2017 se il lavoro è stato pubblicato nel biennio 2018-2019), più il numero di citazioni. I dati provengono da *InCities Journal Citation Reports* e *Scopus*, aggiornati a marzo 2019. **872 citazioni** da papers indicizzati + 2 da un capitolo di libro.

- (A1) Domenica Marabello*, Paola Antoniotti, Paola Benzi, Elena Cariati, **Leonardo Lo Presti**, Carlo Canepa: *Developing new SrI_2 and B-D-fructopyranose-based metal-organic frameworks with nonlinear optical properties*. Acta Crystallographica Section B75 2019, *In press*. DOI: 10.1107/S2052520619001951 (IF: 6.467, Q1(crystallography), Cit: 0)
- (A2) Pietro Sacchi, Laura Loconte, Giovanni Macetti, Silvia Rizzato*, **Leonardo Lo Presti***: *Correlations of Crystal Structure and Solubility in Organic Salts: The Case of the Antiplasmodial Drug Piperaquine*. Cryst. Growth Des. 2019, 19, 1399-1410, DOI: 10.1021/acs.cgd.8b01794 (IF: 3.972, Q1(crystallography), Cit: 0). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A3) Angelo Gavezzotti*, **Leonardo Lo Presti**: *Dynamic simulation of liquid molecular nanoclusters. Structure, stability and quantification of internal (pseudo)symmetries*. New J. Chem., 2019,43, 2077-2084, DOI: 10.1039/C8NJ05825C (IF: 3.201, Q2(chemistry, multidisciplinary), Cit: 0)
- (A4) Andrea Gionda, Giovanni Macetti, Laura Loconte, Silvia Rizzato, Ahmed M. Orlando, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti***: *A variable-temperature X-ray diffraction and theoretical study of conformational polymorphism in a complex organic molecule (DTC)*. RSC Adv., 2018,8, 38445-38454. DOI: 10.1039/C8RA08063A (IF: 2.936, Q2(chemistry, multidisciplinary), Cit: 0)
- (A5) Luca Carlino, Michael Christodoulou, Valentina Restelli, Fabiana Caporuscio, Francesca Foschi, Marta S. Semrau, Elisa Costanzi, Annachiara Tinivella, Luca Pinzi, **Leonardo Lo Presti**, Roberto

- Battistutta, Paola Storici, Massimo Broggin, Daniele Passarella*: *Structure-Activity Relationships of Hexahydrocyclopenta[c]quinoline Derivatives as Allosteric Inhibitors of CDK2 and EGFR*. ChemMedChem 2018, 13, 2627-2634, DOI: 10.1002/cmdc.201800687 (IF: 3.009, Q2(chemistry, medicinal), Cit: 0)
- (A6) Angelo Gavezzotti, Silvia Rizzato, **Leonardo Lo Presti***: *The TACO Puzzle: A Phase-Transition Mystery Revisited*. Crystal Growth & Design 2018, 18, 7219-7227, DOI: 10.1021/acs.cgd.8b01461 (IF: 3.972, Q1(crystallography), Cit: 2). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A7) Giulia Rainoldi, Giordano Lesma, Claudia Picozzi, **Leonardo Lo Presti**, Alessandra Silvani*: *One step access to oxindole-based β -lactams through Ugi four-center three-component reaction*. RSC Advances 2018, 8, 34903-34910, DOI: 10.1039/C8RA08165D (IF: 2.936, Q2 (chemistry, multidisciplinary), Cit: 0)
- (A8) **Leonardo Lo Presti***: *On the significance of weak hydrogen bonds in crystal packing: a large databank comparison of polymorphic structures*. CrystEngComm, 2018, 20, 5976-5989, DOI: 10.1039/C8CE00674A (invited paper for the 2018 "New talent" themed issue) (IF: 3.304, Q2(cristallography), Cit: 3). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A9) Silvia Rizzato*, Massimo Moret*, Fabio Beghi, **Leonardo Lo Presti**: *Crystallization and structural properties of a family of isotopological 3D-networks: the case of 4,4'-bipy ligand - M^{2+} triflate system*. CrystEngComm, 2018,20, 3784-3795. DOI: 10.1039/C8CE00653 (IF: 3.304, Q2(cristallography) Cit: 0)
- (A10) Cinzia Colombo*, Ćrtomir Podlipnik, **Leonardo Lo Presti**, Masahiro Niikura, Andrew J. Bennet, Anna Bernardi: *Design and synthesis of constrained bicyclic molecules as candidate inhibitors of influenza A neuraminidase*. PLoS ONE, 2018, 13(2) e0193623, 1 - 22, DOI: 10.1371/journal.pone.0193623 (IF: 2.766, Q1(multidisciplinary science), Cit: 1)
- (A11) Giulia Rainoldi*, Fabio Beghini, Mariska de Munnik, **Leonardo Lo Presti**, Christophe M. L. Vande Velde, Romano Orru, Giordano Lesma, Eelco Ruijter, Alessandra Silvani: *Sequential Multicomponent Strategy for the Diastereoselective Synthesis of Densely Functionalized Spirooxindole-Fused Thiazolidines*. ACS Combinatorial Science, 2018, 20 (2), 98-105, DOI: 10.1021/acscmbosci.7b00179 (IF: 3.500, Q1(chemistry, applied), Cit: 2)
- (A12) Giovanni Macetti, **Leonardo Lo Presti**, Carlo Gatti*: *Spin density accuracy and distribution in azido Cu(II) complexes: A source function analysis*. Journal of Computational Chemistry, 2018, 39(10), 587-603, DOI: 10.1002/jcc.25150 (IF: 3.221, Q2(chemistry, multidisciplinary), Cit: 1)
- (A13) Lucia Tamborini, Federica Mastronardi, **Leonardo Lo Presti**, Birgitte Nielsen, Carlo De Micheli, Paola Conti, Andrea Pinto*: *Synthesis of l-Tricholomic Acid Analogues and Pharmacological Characterization at Ionotropic Glutamate Receptors*. ChemistrySelect 2017, 2(31):10295-10299, DOI: 10.1002/slct.201702154 (IF: 1.505, Q3(chemistry, multidisciplinary), Cit: 0)
- (A14) Giovanni Di Liberto, Valentina Pifferi, **Leonardo Lo Presti***, Michele Ceotto*, Luigi Falciola*: *Atomistic Explanation for Interlayer Charge Transfer in Metal-Semiconductor Nanocomposites: The Case of Silver and Anatase*. Journal of Physical Chemistry Letters 10/2017, 8, 5372-5377, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.7b02555 (IF: 8.709, Q1(chemistry, physical), Cit: 3)
- (A15) Riccardo Destro*, Riccardo Ruffo, Pietro Roversi, Raffaella Soave, Laura Loconte, **Leonardo Lo Presti**: *Anharmonic motions versus dynamic disorder at the Mg ion from the charge densities in pyrope ($Mg_3Al_2Si_3O_{12}$) crystals at 30 K: Six of one, half a dozen of the other*. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, 04/2017; 73, 722-736, DOI: 10.1107/S2052520617006102 (IF: 6.467, Q1(Crystallography), Cit: 1)
- (A16) Carlo Gatti*, Giovanni Macetti, **Leonardo Lo Presti**: *Insights on spin delocalization and spin polarization mechanisms in crystals of azido copper(II) dinuclear complexes through the electron spin density Source Function*. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, 08/2017, 73(4):565-583, DOI: 10.1107/S2052520617008083 (IF: 6.467,Q1(Crystallography),Cit: 4)
- (A17) Valentina Colombo, **Leonardo Lo Presti***, Angelo Gavezzotti: *Two-component organic crystals without hydrogen bonding: structure and intermolecular interaction in bimolecular stacking*. CrystEngComm 03/2017; 19:2413-2423., DOI:10.1039/C7CE00311K (IF: 3.304, Q2(cristallography) Cit: 5)

- (A18) Daniela Meroni*, **Leonardo Lo Presti***, Giovanni Di Liberto, Michele Ceotto, Robert G Acres, Kevin C Prince, Roberto Bellani, Guido Soliveri, Silvia Ardizzone: *A Close Look at the Structure of the TiO₂-APTES Interface in Hybrid Nanomaterials and Its Degradation Pathway: An Experimental and Theoretical Study*. The Journal of Physical Chemistry C 01/2017; 121:430-440., DOI:10.1021/acs.jpcc.6b10720 (IF: 4.484, Q1(material science, multidisciplinary), Cit: 19)
- (A19) Michael S Christodoulou, Fabiana Caporuscio, Valentina Restelli, Luca Carlino, Giuseppe Cannazza, Elisa Costanzi, Cinzia Citti, **Leonardo Lo Presti**, Pasquale Pisani, Roberto Battistutta, Massimo Broggin, Daniele Passarella, Giulio Rastelli*: *Probing an Allosteric Pocket of CDK2 with Small Molecules*. ChemMedChem 01/2017; 12:33-41., DOI:10.1002/cmdc.201600474 (IF: 3.009, Q2(Chemistry, medicinal), Cit: 8)
- (A20) Giovanni Macetti, Laura Loconte, Silvia Rizzato, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti***: *Intermolecular Recognition of the Antimalarial Drug Chloroquine: A Quantum Theory of Atoms in Molecules-Density Functional Theory Investigation of the Hydrated Dihydrogen Phosphate Salt from the 103 K X-ray Structure*. Crystal Growth & Design 09/2016; 16(10):6043-6054., DOI:10.1021/acs.cgd.6b01069 (IF: 4.055, Q1(crystallography), Cit: 8). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A21) Angelo Gavezzotti, Valentina Colombo, **Leonardo Lo Presti***: *Facts and Factors in the Formation and Stability of Binary Crystals*. Crystal Growth & Design 09/2016; 16(10):6095-6104., DOI:10.1021/acs.cgd.6b01146 (IF: 4.055, Q1(crystallography), Cit: 14)*. **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A22) Giulia Rainoldi, Matteo Faltracco, **Leonardo Lo Presti**, Alessandra Silvani*, Giordano Lesma: *Highly diastereoselective entry to chiral spirooxindole-based 4-methyleneazetidines via formal [2+2] annulation reaction*. Chemical Communications 08/2016; 52(77):11575-11578., DOI:10.1039/C6CC05838H (IF: 6.319, Q1(chemistry, multidisciplinary), Cit: 10)
- (A23) Angelo Gavezzotti, **Leonardo Lo Presti***: *Building Blocks of Crystal Engineering: A Large-Database Study of the Intermolecular Approach between C-H Donor Groups and O, N, Cl, or F Acceptors in Organic Crystals*. Crystal Growth & Design 05/2016; 16(5):2952-2962. DOI:10.1021/acs.cgd.6b00305 (IF: 4.055, Q1(crystallography), Cit: 23). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A24) Michael S. Christodoulou*, Mikel Zarate, Francesca Ricci, Giovanna Damia, Stefano Pieraccini, Federico Dapiaggi, Maurizio Sironi, **Leonardo Lo Presti**, Aida Nelly García-Argáez, Lisa Dalla Via*, Daniele Passarella: *4-(1,2-diarylbut-1-en-1-yl)isobutyranilide derivatives as inhibitors of topoisomerase II*. European Journal of Medicinal Chemistry 04/2016; 118:79-89., DOI:10.1016/j.ejmech.2016.03.090 (IF: 4.519, Q1(chemistry, medicinal), Cit: 8)
- (A25) Carlo Gatti*, Gabriele Saleh*, **Leonardo Lo Presti**: *Source Function applied to experimental densities reveals subtle electron-delocalization effects and appraises their transferability properties in crystals*. Acta Crystallographica Section B: Structural Science 04/2016; 72(2):180-193., DOI:10.1107/S2052520616003450 (IF: 2.032, Q2(Crystallography), Cit: 15)
- (A26) Giovanni Macetti, Silvia Rizzato, Fabio Beghi, Lucia Silvestrini, **Leonardo Lo Presti***: *On the molecular basis of the activity of the antimalarial drug chloroquine: EXAFS-assisted DFT evidence of a direct Fe-N bond with free heme in solution*. Physica Scripta 02/2016; 91(2-2):023001., DOI:10.1088/0031-8949/91/2/023001 (IF: 1.280, Q3(physics, multidisciplinary), Cit: 5)
- (A27) Luca Rimoldi, Claudia Ambrosi, Giovanni Di Liberto, **Leonardo Lo Presti***, Michele Ceotto, Cesare Oliva, Daniela Meroni, Serena Cappelli, Giuseppe Cappelletti, Guido Soliveri, Silvia Ardizzone: *Impregnation versus Bulk Synthesis: How the Synthetic Route Affects the Photocatalytic Efficiency of Nb/Ta:N Codoped TiO₂ Nanomaterials*. The Journal of Physical Chemistry C 10/2015; 119(42):24104-24115., DOI:10.1021/acs.jpcc.5b06827 (IF: 4.509, Q1(material science, multidisciplinary), Cit: 13). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A28) Thomas C Eadsforth, Andrea Pinto, Rosaria Luciani, Lucia Tamborini, Gregorio Cullia, Carlo De Micheli, Luciana Marinelli, Sandro Cosconati, Ettore Novellino, **Leonardo Lo Presti**, Anabela Cordeiro-da-Silva, Paola Conti*, William N Hunter*, Maria Paola Costi*: *Characterization of 2,4-Diamino-6-oxo-1,6-dihydropyrimidin-5-yl Ureido Based Inhibitors of Trypanosoma brucei Fold and Testing for Antiparasitic Activity*. Journal of Medicinal Chemistry 08/2015; 58(20):7938-7948., DOI:10.1021/acs.jmedchem.5b00687 (IF: 5.589, Q1(chemistry, medicinal), Cit: 5)

- (A29) Angelo Gavezzotti, **Leonardo Lo Presti***: *Theoretical Study of Chiral Carboxylic Acids. Structural and Energetic Aspects of Crystalline and Liquid States*. *Crystal Growth & Design* 07/2015; 15(8)., 3792-3803. DOI:10.1021/acs.cgd.5b00442 (IF: 4.425, Q1(crystallography), Cit: 25). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A30) Lucia Tamborini*, Federica Mastronardi, Federica Dall'Oglio, Carlo De Micheli, Birgitte Nielsen, **Leonardo Lo Presti**, Paola Conti, Andrea Pinto: *Synthesis of unusual isoxazoline containing β and γ -dipeptides as potential glutamate receptor ligands*. *MedChemComm* 05/2015; 6(7):1260-1266., DOI:10.1039/C5MD00159E (IF: 2.319, Q3(chemistry, medicinal), Cit: 2)
- (A31) Carlo Gatti*, Ahmed Muhammed Orlando, **Leonardo Lo Presti**: *Insights on Spin Polarization through the Spin Density Source Function*. *Chemical Science* 04/2015; 6(7):3845-3852., DOI:10.1039/C4SC03988B (IF: 9.144, Q1(chemistry, multidisciplinary), Cit: 8)
- (A32) Alessandro Ruffoni*, Alessandro Contini, Raffaella Soave, **Leonardo Lo Presti**, Irene Esposto, Irene Maffucci, Donatella Nava, Sara Pellegrino, Maria Luisa Gelmi, Francesca Clerici*: *Model peptides containing the 3-sulfanyl-norbornene amino acid, a conformationally constrained cysteine analogue effective inducer of 310-helix secondary structures*. *RSC Advances* 04/2015; 5(41):32643-32656., DOI:10.1039/C5RA03805G (IF: 3.289, Q2(chemistry, multidisciplinary), Cit: 12)
- (A33) Francesca Spadavecchia*, Michele Ceotto, **Leonardo Lo Presti**, Chiara Aieta, Iolanda Biraghi, Daniela Meroni, Silvia Ardizzone, Giuseppe Cappelletti: *Second Generation Nitrogen Doped Titania Nanoparticles: A Comprehensive Electronic and Microstructural Picture*. *Chinese Journal of Chemistry* 03/2015; 46(9):1195-1213., DOI:10.1002/cjoc.201400502 (IF: 1.872, Q2(chemistry, multidisciplinary), Cit: 7)
- (A34) **Leonardo Lo Presti***, Mattia Sist, Laura Loconte, Andrea Pinto, Lucia Tamborini, Carlo Gatti: *Rationalizing the Lacking of Inversion Symmetry in a Noncentrosymmetric Polar Racemate: An Experimental and Theoretical Study*. *Crystal Growth & Design* 10/2014; 14(11):5822-5833., DOI:10.1021/cg501074x (IF: 4.891, Q1(crystallography), Cit: 9). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A35) Gabriele Saleh, Carlo Gatti*, **Leonardo Lo Presti***: *Energetics of Non-Covalent Interactions from Electron and Energy Density Distributions*. *Computational and Theoretical Chemistry* 10/2014; 1053:53-59., DOI:10.1016/j.comptc.2014.10.011 (IF: 1.545, Q3(chemistry, physical), Cit: 24)
- (A36) Chiara Marchiori, Giovanni Di Liberto, Guido Soliveri, Laura Loconte, **Leonardo Lo Presti***, Daniela Meroni*, Michele Ceotto, Cesare Oliva, Serena Cappelli, Giuseppe Cappelletti, Chiara Aieta, Silvia Ardizzone: *Unraveling the Cooperative Mechanism of Visible-Light Absorption in Bulk N,Nb Codoped TiO₂ Powders of Nanomaterials*. *The Journal of Physical Chemistry C* 09/2014; 118(41):24152-24164., DOI:10.1021/jp507143z (IF: 4.772, Q1(materials science, multidisciplinary), Cit: 26)
- (A37) **Leonardo Lo Presti***, Ahmed M. Orlando, Laura Loconte, Riccardo Destro, Emanuele Ortoleva, Raffaella Soave, Carlo Gatti*: *Single N-C Bond Becomes Shorter than a Formally Double N=C Bond in a Thiazete-1,1-dioxide Crystal: An Experimental and Theoretical Study of Strong Crystal Field Effects*. *Crystal Growth & Design* 08/2014; 14:4418-4429., DOI:10.1021/cg500518a (IF: 4.891, Q1(crystallography), Cit: 5).
- (A38) Sara Pellegrino*, Alessandro Contini, Maria Luisa Gelmi, **Leonardo Lo Presti**, Raffaella Soave, Emanuela Erba: *Asymmetric Modular Synthesis of a Semirigid Dipeptide Mimetic by Cascade Cycloaddition/Ring Rearrangement and Borohydride Reduction*. *The Journal of Organic Chemistry* 03/2014; 79(7):3094-3102., DOI:10.1021/jo500237j (IF: 4.721, Q1(chemistry, organic), Cit: 18)
- (A39) **Leonardo Lo Presti***, Michele Ceotto, Francesca Spadavecchia, Giuseppe Cappelletti, Daniela Meroni, Robert G. Acres Silvia Ardizzone: *Role of the Nitrogen Source in Determining Structure and Morphology of N-Doped Nanocrystalline TiO₂*. *The Journal of Physical Chemistry C* 02/2014; 118(9):4797-4807., DOI:10.1021/jp412394e (IF: 4.772, Q1(materials science, multidisciplinary), Cit: 24). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A40) Mattia Allietta*, Marco Scavini, **Leonardo Lo Presti**, Mauro Coduri, Laura Loconte, Serena Cappelli, Cesare Oliva, Paolo Ghigna, Phil Pattison, Valerio Scagnoli: *Charge ordering transition in GdBaCo₂O₅: Evidence of reentrant behavior*. *Physical Review B* 12/2013; 88(21):214104., DOI:10.1103/PhysRevB.88.214104 (IF: 3.664, Q1(physics, condensed matter), Cit: 13)

- (A41) Roberta Ettari*, Lucia Tamborini, Ilenia C Angelo, Silvana Grasso, Tanja Schirmeister, **Leonardo Lo Presti**, Carlo De Micheli, Andrea Pinto*, Paola Conti: *Development of Rhodesain Inhibitors with a 3-Bromoisoaxazoline Warhead*. ChemMedChem 11/2013; 8(12):2070-2076., DOI:10.1002/cmdc.201300390 (IF: 3.046, Q2(Chemistry, medicinal), Cit: 19)
- (A42) Gabriele Saleh*, **Leonardo Lo Presti**, Carlo Gatti, Davide Ceresoli: *NCImilano: An electron-density-based code for the study of noncovalent interactions*. Journal of Applied Crystallography 10/2013; 46(5):1513-1517., DOI:10.1107/S0021889813020098 (IF: 3.950, Q1(crystallography), Cit: 38)
- (A43) Riccardo Destro*, Elisabetta Sartirana, Laura Loconte, Raffaella Soave, Pietro Colombo, Claudio Destro, **Leonardo Lo Presti**: *Competing C=O...C=O, C-H...O, Cl...O, and Cl...Cl Interactions Governing the Structural Phase Transition of 2,6-Dichloro-p-benzoquinone at T_c = 122.6 K*. Crystal Growth & Design 08/2013; 13(10-10):4571-4582., DOI:10.1021/cg401123s (IF: 4.558, Q1 (crystallography), Cit: 17)
- (A44) Gabriele Saleh, Raffaella Soave*, **Leonardo Lo Presti***, Riccardo Destro: *Progress in the Understanding of the Key Pharmacophoric Features of the Antimalarial Drug Dihydroartemisinin: An Experimental and Theoretical Charge Density Study*. Chemistry - A European Journal 01/2013; 19(10):3490-3503., DOI:10.1002/chem.201202486 (IF: 5.696, Q1(chemistry, multidisciplinary), Cit: 12). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A45) Gabriele Saleh, Carlo Gatti*, **Leonardo Lo Presti***: *Non-covalent interaction via the reduced density gradient: Independent atom model vs experimental multipolar electron densities*. Computational and Theoretical Chemistry 10/2012; 998:148-163., DOI:10.1016/j.comptc.2012.07.014 (IF: 1.139, Q4 (chemistry, physical), Cit: 37)
- (A46) Francesca Spadavecchia*, Giuseppe Cappelletti, Silvia Ardizzone, Michele Ceotto, Matteo Simone Azzola, **Leonardo Lo Presti**, Giuseppina Cerrato, Luigi Falciola: *Role of Pr on the Semiconductor Properties of Nanotitania. An Experimental and First-Principles Investigation*. The Journal of Physical Chemistry C 10/2012; 116(43):23083-23093., DOI:10.1021/jp307303n (IF: 4.814, Q1(materials science, multidisciplinary), Cit: 16)
- (A47) Gabriele Saleh, Carlo Gatti*, **Leonardo Lo Presti***, Julia Contreras-García: *Revealing Non-Covalent Interactions in Molecular Crystals through Their Experimental Electron Densities..* Chemistry - A European Journal 10/2012; 18(48):15523-15536., DOI:10.1002/chem.201201290 (IF: 5.831, Q1(chemistry, multidisciplinary), Cit: 69). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A48) Lucia Tamborini, Andrea Pinto, Terry K Smith, Louise L Major, Maria C Iannuzzi, Sandro Cosconati, Luciana Marinelli, Ettore Novellino, **Leonardo Lo Presti**, Pui E Wong, Michael P Barrett, Carlo De Micheli, Paola Conti*: *Synthesis and Biological Evaluation of CTP Synthetase Inhibitors as Potential Agents for the Treatment of African Trypanosomiasis*. ChemMedChem 08/2012; 7(9):1623-34., DOI:10.1002/cmdc.201200304 (IF: 2.835, Q2(Chemistry, medicinal) Cit: 23)
- (A49) Tam Luong Nguyen, Maria Rosaria Cera, Andrea Pinto, **Leonardo Lo Presti**, Ernest Hamel, Paola Conti, Rick Gussio, Peter De Wulf*: *Evading Pgp Activity in Drug-Resistant Cancer Cells: A Structural and Functional Study of Antitubulin Furan Metotica Compounds*. Molecular Cancer Therapeutics 03/2012; 11(5):1103-11., DOI:10.1158/1535-7163.MCT-11-1018 (IF: 5.599, Q1(oncology), Cit: 11)
- (A50) Michele Ceotto*, **Leonardo Lo Presti***, Giuseppe Cappelletti, Daniela Meroni, Francesca Spadavecchia, Roberto Zecca, Matteo Leoni, Paolo Scardi, Claudia L. Bianchi, Silvia Ardizzone: *About the nitrogen location in nanocrystalline N-doped TiO₂: Combined DFT and EXAFS approach*. The Journal of Physical Chemistry C 01/2012; 116(2):1764-1771., DOI:10.1021/jp2097636 (IF: 4.814, Q1(materials science, multidisciplinary), Cit: 47). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A51) **Leonardo Lo Presti***, Mattia Allietta, Marco Scavini, Paolo Ghigna, Laura Loconte, Valerio Scagnoli, Michela Brunelli: *Crystal structure and structural phase transitions in the GdBaCo₂O_{5.0} cobaltite*. Physical review. B, Condensed matter 09/2011; 84(10)., DOI:10.1103/PhysRevB.84.104107 (IF: 3.691, Q1(physics, condensed matter), Cit: 15). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A52) **Leonardo Lo Presti***, Arkady Ellern, Riccardo Destro*, Raffaella Soave, Bruno Lunelli: *Rationalizing the Effect of Halogenation on the Molecular Structure of Simple Cyclobutene Derivatives by*

- Topological Real-Space Analysis of Their Electron Density*. The Journal of Physical Chemistry A 07/2011; 115(45):12695-707., DOI:10.1021/jp203615x (IF: 2.946, Q2(chemistry, physical), Cit: 9)
- (A53) Emanuele Monza, Carlo Gatti*, **Leonardo Lo Presti***, Emanuele Ortoleva: *Revealing Electron Delocalization through the Source Function*. The Journal of Physical Chemistry A 07/2011; 115(45):12864-78., DOI:10.1021/jp204000d (IF: 2.946, Q2(chemistry, physical), Cit: 36)
- (A54) Lucia Tamborini*, Andrea Pinto, Paola Conti, Maddalena Gallanti, MC Iannuzzi, **Leonardo Lo Presti**, Carlo De Micheli: *Regioselective Preparation of Functionalized Isoxazoline Derivatives as Key Intermediates for the Synthesis of Selective N-Methyl-D-aspartate Receptor Antagonists*. Synthesis 04/2011; DOI:10.1055/s-0030-1258477 (IF: 2.466, Q1(chemistry, organic), Cit: 1)
- (A55) Luca Beverina*, Alessandro Sanguineti, Glauco Battagliarin, Riccardo Ruffo, Dominique Roberto, Stefania Righetto, Raffaella Soave, **Leonardo Lo Presti**, Renato Ugo, Giorgio A Pagani*: *UV absorbing zwitterionic pyridinium-tetrazolate: Exceptional transparency/optical nonlinearity trade-off*. Chemical Communications 01/2011; 47(1):292-4., DOI:10.1039/c0cc01652g (IF: 6.169, Q1(chemistry, multidisciplinary), Cit: 13)
- (A56) **Leonardo Lo Presti***, Raffaella Soave, Mariangela Longhi, Emanuele Ortoleva: *Conformational polymorphism in a Schiff-base macrocyclic organic ligand: An experimental and theoretical study*. Acta crystallographica. Section B, Structural science 10/2010; 66(Pt 5):527-43., DOI:10.1107/S0108768110029514 (IF: 1.829, Q2(crystallography), Cit: 13)
- (A57) Clelia Dallanocce*, Pietro Magrone, Carlo Matera, **Leonardo Lo Presti**, Marco De Amici, Loredana Riganti, Francesco Clementi, Cecilia Gotti, Carlo De Micheli: *Synthesis of novel chiral Δ^2 -isoxazoline derivatives related to ABT-418 and estimation of their affinity at neuronal nicotinic acetylcholine receptor subtypes*. European Journal of Medicinal Chemistry 09/2010; 45(12):5594-601., DOI:10.1016/j.ejmech.2010.09.009 (IF: 3.193, Q1(chemistry, medicinal), Cit: 10)
- (A58) Ahmed M Orlando, **Leonardo Lo Presti***, Raffaella Soave: *A new monoclinic polymorph of 3-diethyl-amino-4-(4-meth-oxy-phen-yl)-1,1-dioxo-4H-1 λ ,2-thia-zete-4-carbonitrile*. Acta Crystallographica Section E Structure Reports Online 08/2010; 66(Pt 8):o2032-3., DOI:10.1107/S1600536810027558 (IF: 0.413, Q4(crystallography), Cit: 2)
- (A59) Riccardo Destro*, Emanuele Ortoleva, Raffaella Soave, Laura Loconte, **Leonardo Lo Presti**: *Detection and kinetics of the single-crystal to single-crystal complete transformation of a thiiuranium ion into thietanium ion*. Physical Chemistry Chemical Physics 10/2009; 11(33):7181-8., DOI:10.1039/b901928f (IF: 4.116, Q1(chemistry, physical), Cit: 5)
- (A60) **Leonardo Lo Presti***, Carlo Gatti*: *Using the Source Function descriptor to dampen the multipole model bias in charge density studies from X-ray structure factors refinements*. Chemical Physics Letters 07/2009; 476(4-6):308-316., DOI:10.1016/j.cplett.2009.06.022 (IF: 2.29, Q2(chemistry, physical), Cit: 19)
- (A61) **Leonardo Lo Presti***, Arkady Ellern, Riccardo Destro, Bruno Lunelli: *Effect of Methoxy Substituents on the Structural and Electronic Properties of Fluorinated Cyclobutenes: A Study of Hexafluorocyclobutene and Its Vinyl Methoxy Derivatives by XRD and Periodic DFT Calculations*. The Journal of Physical Chemistry A 05/2009; 113(13):3186-96., DOI:10.1021/jp8084809 (IF: 2.899, Q1(Physics, atomic, molecular and chemical), Cit: 12)
- (A62) **Leonardo Lo Presti***, Riccardo Destro: *Experimental and theoretical charge density distribution of the colossal magnetoresistive transition metal sulfide FeCr_2S_4* . The Journal of Chemical Physics 02/2008; 128(4):044710., DOI:10.1063/1.2822160 (IF: 3.149, Q1(physics, atomic, molecular and chemical) Cit: 14)
- (A63) **Leonardo Lo Presti***, Raffaella Soave, Riccardo Destro: *On the Interplay between $\text{CH}\cdots\text{O}$ and $\text{OH}\cdots\text{O}$ Interactions in Determining Crystal Packing and Molecular Conformation: An Experimental and Theoretical Charge Density Study of the Fungal Secondary Metabolite Austdiol ($\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{O}_5$)*. The Journal of Physical Chemistry B 04/2006; 110(12):6405-14., DOI:10.1021/jp056823y (IF: 4.115, Q1(chemistry, physical), Cit: 36). **Selezionato tra le pubblicazioni presentate a scelta del candidato.**
- (A64) **Leonardo Lo Presti**, Donatella Invernizzi, Raffaella Soave, Riccardo Destro*: *Looking for structural phase transitions in the colossal magnetoresistive thiospinel FeCr_2S_4 by a multi-temperature single-crystal X-ray diffraction study*. Chemical Physics Letters 11/2005; 416(1-3):28-32., DOI:10.1016/j.cplett.2005.09.037 (IF: 2.438, Q2(chemistry, physical), Cit: 8)

- (A65) Riccardo Destro*, Raffaella Soave, Mario Barzaghi, **Leonardo Lo Presti**: *Progress in the Understanding of Drug-Receptor Interactions, Part 1: Experimental Charge-Density Study of an Angiotensin II Receptor Antagonist (C₃₀H₃₀N₆O₃S) at T=17 K*. Chemistry-A european Journal 08/2005; 11(16):4621-34., DOI:10.1002/chem.200400964 (IF: 4.907, Q1(chemistry, multidisciplinary), Cit: 30)
- (A66) Riccardo Destro*, Laura Loconte, **Leonardo Lo Presti**, Pietro Roversi, Raffaella Soave: *On the role of data quality in experimental charge-density studies*. Acta Crystallographica Section A Foundations of Crystallography 10/2004; 60(Pt 5):365-70., DOI:10.1107/S0108767304014813 (IF: 1.829, Q1(crystallography), Cit: 12)
- (A67) **Leonardo Lo Presti**, Raffaella Soave*, Riccardo Destro: *The Fungal Metabolite Austdiol (I)*. Acta Crystallographica Section C Crystal Structure Communications 08/2003; 59(Pt 4):O199-201., DOI:10.1002/chin.200334211 (IF: 0.828, Q3(crystallography), Cit: 9)
- (A68) Francesca Clerici*, Maria Luisa Gelmi, Raffaella Soave, **Leonardo Lo Presti**: *Isothiazoles. Part 13. Synthesis of Sulfamic Esters, [1,2]Thiazete S,S-Dioxides, Benzo[e][1,2]thiazine S,S-Dioxides or Triazoles by Reaction of Isothiazole Dioxides with Sodium Azide*. Tetrahedron 06/2002; 58(25):5173-5178., DOI:10.1016/S0040-4020(02)00445-3 (IF: 2.420, Q1(chemistry, organic), Cit: 16)

b. Capitoli di libri

- C. Gatti, A. M. Orlando, E. Monza, L. **Lo Presti**, "Exploring Chemistry Through the Source Function for the Electron and the Electron Spin Densities", invited monography for the book on "Applications of Topological Methods in Molecular Chemistry", Ed. R. Chauvin, C. Lepetit, B. Silvi, E. Alikhani, on behalf of Springer Ed. (2016), DOI: 10.1007/978-3-319-29022-5_5; ISBN: 978-3-319-29020-1. Cit: 0 (Altmetry: 611 downloads)
- R. Destro, R., L. **Lo Presti**, R. Soave, A. E. Goeta, "Multi-temperature charge density studies", invited monography for the book on "Modern Charge Density Analysis", Ed. C. Gatti and P. Macchi, on behalf of Springer Ed. (2010), DOI: 10.1007/978-90-481-3836-4_19; ISBN: 978-90-481-3835-7. Cit: 2 (Altmetry: 1.15 k downloads)

c. Comunicazioni orali a congressi (la persona che ha presentato il lavoro è sottolineata).

- (O1) A crystallographic route to understand drug solubility: the case of 4-aminoquinoline antimalarials
Leonardo Lo Presti, Silvia Rizzato
Invited keynote lecture at the international MISCA-V conference (Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations), Naples, Italy, September 4-7, 2019 (forthcoming)
- (O2) Structural and electronic properties of N-doped TiO₂/SnO₂ photocatalysts for air pollutant remediation
Daniela Meroni, Laura Tripaldi, Luca Rimoldi, **Leonardo Lo Presti**
Co-author in a contributed talk at the International Symposium on Inorganic and Environmental Materials (ISIEM2018), Pand - Onderbergen, Ghent, Belgium, June 17-21, 2018.
- (O3) Gaining insights on chemistry from the analysis of the charge density
Leonardo Lo Presti
Invited talk at the CrisDi workshop on "The Role of Crystallography in Drug Science and Biology", Torino, Italy, 05 March 2018
- (O4) On the interplay among non-covalent interactions and activity of 4-Aminoquinoline antimalarials: A crystallographic and spectroscopic study
Leonardo Lo Presti, Silvia Rizzato, Pietro Sacchi, Giovanni Macetti, Laura Loconte, Fabio Beghi, Lucia Silvestrini
Presenting Author in a contributed talk at the XLVI Annual Meeting of the Italian Crystallographic Association, Perugia, Italy, 26 - 29 June 2017
- (O5) Silver nanoparticles/nanostructured TiO₂ interface: a photo -renewable "silver-ions electrode" for neurotransmitters detection
Valentina Pifferi, Giovanni Di Liberto, Guido Soliveri, Guido Panzarasa, Daniela Meroni, Silvia Ardizzone, Michele Ceotto, **Leonardo Lo Presti**, Luigi Falciola

Co-Author in a contributed talk at the XXI Topical Meeting of the International Society of Electrochemistry, Szeged, Hungary, 23 - 26 April 2017

(O6) Study of the key interactions in the self-recognition of an antimalarial drug

Giovanni Macetti, Silvia Rizzato, Laura Loconte, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in a contributed talk at the 7th European Charge Density Meeting (ECDM-7), Warsaw, Poland, 16 June - 1 July 2016

(O7) Photo-renewable electroanalytical sensor for neurotransmitter detection: the role of silver ion nanoparticles

Valentina Pifferi, Giovanni Di Liberto, Guido Soliveri, Guido Panzarasa, Michele Ceotto, **Leonardo Lo Presti**, Luigi Falciola

Co-Author in a contributed plenary lecture at the 16th International Conference on Electroanalysis (ESEAC 2016), The Assembly Rooms, Bath, June 12-16, 2016

(O8) Silver cations electroanalytical sensor: sensitivity and selectivity in the detection of neurotransmitters

Valentina Pifferi, Giovanni Di Liberto, Guido Soliveri, Guido Panzarasa, Michele Ceotto, **Leonardo Lo Presti**, Luigi Falciola

Co-Author in a contributed talk at the 3rd Sensor National Congress (Convegno Nazionale Sensori), CNR hall, Piazzale Aldo Moro 7, Rome, Italy, February 23-25, 2016

(O9) Principal component analysis methods applied to crystallographic and charge density problems

Leonardo Lo Presti, Angelo Gavezzotti

Contributed talk at the Centre for Materials Crystallography (CMC) annual meeting, Goettingen, Germany, 28-30 January, 2016

(O10) Synchrotron radiation in environmental remediation: Shedding light on the structural and electronic properties of second generation photocatalysts

Daniela Meroni, **Leonardo Lo Presti**, Michele Ceotto, Giuseppe Cappelletti

Co-Author in a keynote lecture at the XXIII SILS (Società Italiana di Luce di Sincrotrone) Meeting, via Tommaso Gar 14, Trento, Italy, July 8-10, 2015

(O11) Unveiling interactions of the antimalarial drug chloroquine with haeme in aqueous solutions through spectroscopic and quantum mechanical methods

Leonardo Lo Presti, Giovanni Macetti, Fabio Beghi, Silvia Rizzato

Contributed talk at the SAGAMORE XVIII Conference on Charge, Spin and Momentum Densities, Santa Margherita di Pula (CA), Italy, June 7-12, 2015

(O12) Progettazione di nuovi materiali per l'abbattimento di inquinanti : Come proteggere i nostri monumenti (Development of novel materials for pollutant remediation: How to protect our cultural heritage)

Michele Ceotto, Giuseppe Cappelletti, Dario Tamascelli, Paola Fermo, Luigi Falciola, **Leonardo Lo Presti**, Silvia Ardizzone

Co-Author in a contributed talk at the National Meeting on "High-performance computing for innovation and competitiveness of research and small-medium enterprises in Lombardy: Calls for the LISA 2014 initiative and opportunities for the H2020 program" ("Il calcolo ad alte prestazioni per l'innovazione e la competitività della ricerca e delle PMI lombarde : I bandi LISA 2014 e le opportunità nell'ambito di Horizon 2020"), Grattacielo Pirelli, Milano (Italy), February 18, 2014

(O13) Understanding the lacking of inversion symmetry in an acentric polar racemate

Leonardo Lo Presti, Mattia Sist, Laura Loconte, Carlo Gatti

Contributed talk at the Centre for Materials Crystallography (CMC) annual meeting, Aarhus, Denmark, October 8-10, 2014

(O14) Doped nano-titania: theoretical insight into structure-property relationships

Michele Ceotto, **Leonardo Lo Presti**, Laura Loconte, Daniela Meroni, Luigi Falciola, Valentina Pifferi, Guido Soliveri, Giuseppe Cappelletti, Chiara D. Aieta, Robert G. Acres, Silvia Ardizzone

Co-Author in a contributed talk at XXV National Congress of the Italian Chemical Society (Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, SCI-2014), Arcavacata di Rende, Italy, September, 7-12 2014

(O15) Doped Titania Nanocrystals Explained By Experimental And DFT Characterizations

Michele Ceotto, **Leonardo Lo Presti**, Giuseppe Cappelletti, Luigi Falciola, Daniela Meroni, Francesca Spadavecchia, Silvia Ardizzone

Co-Author in a contributed talk at XL National Congress of Physical Chemistry, Alessandria, Italy June 23-27, 2013

(O16) Revealing electron delocalization through the Source Function

Carlo Gatti, Emanuele Monza, **Leonardo Lo Presti**, Gabriele Saleh

Co-Author in a contributed talk at the 1st National Congress of the Division of Theoretical and Computational Chemistry of the Italian Chemical Society, Pisa, February 22-23, 2012

(O17) Using X-ray Derived Charge Densities to Detect Electron Delocalization Effects and Non-covalent Interactions

Carlo Gatti, Gabriele Saleh, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in an invited talk at the 6th European Charge Density Meeting (ECDM-6), Štrbské pleso, Slovakia, September 15-20, 2012

(O18) Making experiments and theory talking together: electron delocalization effects and non-covalent interactions detection via the Source Function and the Reduced Density Gradient

Carlo Gatti, Gabriele Saleh, **Leonardo Lo Presti**, Emanuele Monza

Co-Author in an invited talk at the SAGAMORE XVII Conference on Charge, Spin and Momentum Densities: "Great potentials for Advances Probes", Daini Mesui Tei, Hokkaido, Japan, 15-20 July 2012

(O19) Revealing electron delocalization through the Source Function

Carlo Gatti, Emanuele Monza, **Leonardo Lo Presti**, Gabriele Saleh

Co-Author in a invited talk at the symposium "X-ray and Neutron Scattering for Solving Structures and Modelling Charge Densities: The Last 40 Years (A colloquium in honor of Pierre J. Becker)", Chateau des sept tours 37330, Courcelles de Touraine, France, September 16-17, 2011

(O20) Evaluation of the Source Function in C₄F₆ and Mn₂(CO)₁₀

Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Invited practical tutorial (30') at the Workshop on XD2006 Program Package "Advanced Methods in X-ray Charge Density Analysis: Extracting Properties from a Multipole Refinement", Martina Franca, Italy, 3-6 September, 2007

(O21) Exploring a phase transition by a charge-density study

Elisabetta Sartirana, Laura Loconte, **Leonardo Lo Presti**, Raffaella Soave, Riccardo Destro

Co-Author in a contributed talk at the 4th European Charge Density Meeting (ECDM-IV), Brandenburg on the Havel, Germany, January 26-29, 2006

(O22) Gain from charge-density-quality X-ray diffraction experiment

Riccardo Destro, Laura Loconte, **Leonardo Lo Presti**, Raffaella Soave

Co-Author in a contributed talk at the 3rd European Charge Density Meeting (ECDM-3), Sandbjerg Estate, Denmark, June 24-29, 2003

d. Poster scientifici (il nome della persona che ha presentato il lavoro è sottolineato)

(P1) Correlations among solubility and crystal structure: a crystallographic and spectroscopic study of the antimalarial drug piperazine

Pietro Sacchi, Giovanni Macetti, Silvia Rizzato, Laura Loconte, Fabio Beghi, **Leonardo Lo Presti**

Co-author in poster session at the 3rd joint AIC-SILS conference, Rome, Italy, 25-28 June 2018

(P2) Correlations among solubility and crystal structure: a crystallographic and spectroscopic study of the antimalarial drug piperazine (precedente versione, con risultati preliminari, del poster P1)

Pietro Sacchi, Giovanni Macetti, Silvia Rizzato, Laura Loconte, Fabio Beghi, **Leonardo Lo Presti**

Co-author in poster session at the congress Italian Crystal Growth 2017, Milano, Italy, 20-21 November 2017

(P3) Synthesis and evaluation of bicyclo[3.1.0]hexane carboxylic acids as candidate inhibitors of influenza A neuraminidases

Cinzia Colombo, C. Podlipnik, **Leonardo Lo Presti**, Anna Bernardi, B. M. Pinto, A. J. Bennet

Co-author in poster session at the Carbohydrates Gordon Research Conference, Mount Snow West Dover, VT, USA, 25 - 30 June 2017

(P4) Nanoparticles Based on Fructose and Alkali-Earth Halogenides with Second Harmonic Generation properties for applications as bio-sensors and for Radiotherapy

Domenica Marabello, Paola Antoniotti, Alessandro Barge, Paola Benzi, Valentina Boscaro, Carlo Canepa, Margherita Gallicchio, Elena Peira, **Leonardo Lo Presti**
Co-Author in poster session at the the XLVI Annual Meeting of the Italian Crystallographic Association, Perugia, Italy, 26 - 29 June 2017

(P5) Source Function applied to experimental densities reveals subtle electron delocalization effects and appraises their transferability properties in crystals

Carlo Gatti, Gabriele Saleh, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the 7th European Charge Density Meeting, Warsaw, Poland, June 26-July 1, 2016

(P6) Experimental and theoretical study of the mechanism of action of the antimalarial drug chloroquine

Giovanni Macetti, Silvia Rizzato, Laura Loconte, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the 4th meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA-4), Puerto de la Cruz, Tenerife, Spain, June 21-25, 2016

(P7) Non-innocent role of ligands in some Ni organometallic complexes as viewed through the spin density source function

Ahmed. M. Orlando, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the XXIX European Crystallographic Meeting, Rovinj, Croatia, August 23-28, 2015

(P8) Looking for indirect correlations among charge density and NLO properties: the case of a simple pyridinium tetrazolate

Authors: Fabio Beghi, Emanuele Ortoleva Raffaella Soave, Laura Loconte, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the SAGAMORE XVIII Conference on Charge, Spin and Momentum Densities, Santa Margherita di Pula (CA), Italy, June 7-12, 2015

(P9) Understanding self-recognition in the antimalarial drug chloroquine: an experimental and theoretical charge density study

Giovanni Macetti, Silvia Rizzato, Laura Loconte, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the SAGAMORE XVIII Conference on Charge, Spin and Momentum Densities, Santa Margherita di Pula (CA), Italy, June 7-12, 2015

(P10) Decoding conformational polymorphism in a thiazete-1,1-dioxide

Authors: Ahmed M. Orlando, Laura Loconte, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the SAGAMORE XVIII Conference on Charge, Spin and Momentum Densities, Santa Margherita di Pula (CA), Italy, June 7-12, 2015

(P11) Towards the understanding of structure-properties relationships in N,Nb doped TiO₂ nanopowders: a multidisciplinary experimental and DFT approach

Leonardo Lo Presti, Michele Ceotto, Daniela Meroni, Francesca Spadavecchia, Laura Loconte, Luigi Falciola, Giuseppe Cappelletti, Silvia Ardizzone

Presented at the SAGAMORE XVIII Conference on Charge, Spin and Momentum Densities, Santa Margherita di Pula (CA), Italy, June 7-12, 2015

(P12) Second generation photocatalysts by metal and nitrogen codoping. The role of Ta and Nb

Luca Rimoldi, Claudia Ambrosi, Guido Soliveri, Giuseppe Cappelletti, Serena Cappelli, Michele Ceotto, **Leonardo Lo Presti**, Daniela Meroni, Cesare Oliva, Silvia Ardizzone

Co-Author in poster session at the Fifth International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP5), Saint Petersburg, Russian Federation, July 27-31, 2015

(P13) Decoding conformational polymorphism in organic substances

Ahmed M. Orlando, Laura Loconte, Emanuele Ortoleva, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the XXIII International Union of Crystallography Congress, Montreal, Canada, August 5-12, 2014

(P14) Conformational polymorphism in a thiazete-1,1 dioxide derivative: a charge density study

Ahmed M. Orlando, **Leonardo Lo Presti**, Laura Loconte, Emanuele Ortoleva

Co-Author in poster session at the workshop "Natta's Seeds Grow: From the crystallography and modeling of stereoregular polymers to the challenges of complex systems", Politecnico di Milano, Milano, Italy, November 21-22, 2013

(P15) Chemical bonding and intermolecular interactions of a non-centrosymmetric racemate with Z'=2

Mattia Sist, **Leonardo Lo Presti**, Laura Loconte, Carlo Gatti

Co-Author in poster session at the workshop “Natta’s Seeds Grow: From the crystallography and modeling of stereoregular polymers to the challenges of complex systems”, Politecnico di Milano, Milano, Italy, November 21-22, **2013**

(P16) Experimental and theoretical charge density study of an antimalarial drug

Raffaella Soave, Gabriele Saleh, **Leonardo Lo Presti**, Riccardo Destro

Co-Author in poster session at the workshop “Natta’s Seeds Grow: From the crystallography and modeling of stereoregular polymers to the challenges of complex systems”, Politecnico di Milano, Milano, Italy, November 21-22, **2013**

(P17) NCI-milano: an Electron Density based code for the study of Non-Covalent Interactions

Gabriele Saleh, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the Gordon 2013 Research Conference on Electron Distribution & Chemical Bonding: Pushing the Limits of Experimental and Theoretical Charge and Spin Density Studies, Les Diablerets, Switzerland, June 02-07, **2013**

(P18) Non-covalent interactions descriptor using experimental electron densities

Gabriele Saleh, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**, Julia Contreras-Garcia

Co-Author in poster session at the “Small Molecules in Interactions, International Symposium”, Faculty of Chemistry Ruhr Universität Bochum, Germany (DK), March 26-27, **2012**

(P19) Non-Covalent Interactions Revealed by Mapping the Energy Density on the Reduced Density Gradient Isosurfaces

Gabriele Saleh, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in poster session at the VI European Charge Density Meeting ECDM-6, Štrbské Pleso, Slovakia, September 15-20, **2012**

(P20) Revealing electron conjugation through an observable

Carlo Gatti, Emanuele Monza, **Leonardo Lo Presti**, Gabriele Saleh

Co-Author in poster session at the XXII IUCr Congress, Madrid, Spain, August 22-30, **2011**

(P21) Non-Covalent Interactions descriptor using experimental electron densities

Gabriele Saleh, Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**, Julia Contreras-Garcia

Co-Author in poster session at the XXII IUCr Congress, Madrid, Spain, August 22-30, **2011**

(P22) Using the Source Function to reveal and dampen the Multipole Model bias in Charge Density Studies from X-ray structure factors refinements

Carlo Gatti, **Leonardo Lo Presti**

Co-Author in a poster session at the SAGAMORE XVI Conference on Charge, Spin and Momentum Densities, Santa Fe, New Mexico (USA), 2-7 August, **2009**

(P23) The Multipolar Model Bias on Primary Densities as revealed by the source Function Descriptor

Leonardo Lo Presti, Carlo Gatti

Presented at the 5th European Charge Density Meeting, Gravedona, Lake Como, Italy, June 6-11, **2008**

(P24) The phase transition of chloranil: an experimental and theoretical study

Leonardo Lo Presti, Elisabetta Sartirana, Laura Loconte, Raffaella Soave, Riccardo Destro

Presented at the School of Ab-Initio Modeling in Solid State Chemistry (MSSC-2006), University of Torino, Turin, Italy, September 03-09, **2006**

e. Conference papers

(C1) Insights on spin-density delocalization/polarization mechanisms through the source function

Carlo Gatti, G. Macetti, L. Lo Presti, Acta Crystallographica Section A 2017, 73(a2):C1434-C1434, DOI: 10.1107/S2053273317081426

(C2) Non-innocent role of ligands in some Ni organometallic complexes as viewed through the spin density source function

A. M. Orlando, C. Gatti, L. Lo Presti, Acta Crystallographica Section A 2015, 71(a1):s416-s416, DOI: 10.1107/S2053273315093857

(C3) Decoding conformational polymorphism in organic substances

A. M. Orlando, L. Loconte, E. Ortoleva, C. Gatti, L. Lo Presti, Acta Crystallographica Section A 2014, 70(a1):C557-C557, DOI: 10.1107/S205327331409442X

(C4) Non-Covalent Interactions descriptor using experimental electron densities

G. Saleh, C. Gatti, L. Lo Presti, J. Contreras-García, Acta Crystallographica Section A 2011, 67(a1) C448, DOI: 10.1107/S0108767311088702

(C5) Revealing electron conjugation through an observable

C. Gatti, E. Monza, L. Lo Presti, G. Saleh, Acta Crystallographica Section A 2011, 67(a1) C443, DOI: 10.1107/S0108767311088829

f. Lista e dettaglio dei progetti finanziati

1. Finanziamenti per risorse di calcolo ad alte prestazioni

Il costo del grant è stimato moltiplicando il numero di CPU core hours equivalenti per un costo fisso stimato di 0.15 € per ora (HPC and CAE: the CINECA offer, Arlandini, Bologna 2013, slide 23: https://hpc-forge.cineca.it/files/CoursesDev/public/2013/Industrial_Forum_Bologna2013). In totale, le risorse computazionali ammontano approssimativamente a ≈ 100 k€ come CPU core hours.

(F1) Istituzione: CINECA Italian supercomputing centre

Iniziativa: IS CRA C

Webpage: <http://www.hpc.cineca.it/services/iscra>

Titolo: Computational study of Ta/Nb perovskite compounds for electro-optical applications

Acronimo: OPTIPER

Grant number: HP10C4QH2

Inizio-termina: 11 Aprile 2018 to 11 Gennaio, 2019

CPU core hours equivalenti: 50 000

Ammontare monetario equivalente: 7 500 €

Il mio ruolo: PI

Pubblicazioni: 0 (1 in preparazione)

Descrizione: Calcoli quantistici nel solido per predire il diagramma di fase di perovskiti contenenti Ta/Nb con applicazioni ottiche.

(F2) Istituzione: CINECA Italian supercomputing centre

Iniziativa: LISA

Webpage: <http://www.hpc.cineca.it/services/lisa>

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

Acronimo: MODEFRUC

Grant number: HPL13PXLVY

Inizio-Termina: 20 April, 2017 to 20 April, 2018

CPU core hours equivalenti: 87 500

Ammontare monetario equivalente: 13 000 €

Il mio ruolo: PI

Pubblicazioni: P4, A1

Descrizione: Predizione da principi primi di proprietà ottiche non lineari di nuove impalcature molecolari organometalliche basate su beta-D-fructopiranosio e alogenuri di metalli alcalini, con focus sulla generazione di seconda armonica.

(F3) Istituzione: CINECA Italian supercomputing centre

Iniziativa: IS CRA C

Webpage: <http://www.hpc.cineca.it/services/iscra>

Titolo: Quantum modelling of the mode of action of the antimalarial drug piperazine

Acronimo: MODELPIP

Grant number: HP10CVU0HA

Inizio-termina: Friday, 6 November, 2015 to Saturday, 6 August, 2016

CPU core hours equivalenti: 200 000

Ammontare monetario equivalente: 30 000 €

Il mio ruolo: PI

Pubblicazioni: O1, P1, P2, A20

Descrizione: Simulazioni esplorative al livello di teoria B3LYP 6-311G(p,d) per cercare i conformeri più stabili della piperachina in fase gas e per testare la capacità della molecola di legare Fe³⁺.

(F4) Istituzione: CINECA Italian supercomputing centre

Iniziativa: IS CRA C

Webpage: <http://www.hpc.cineca.it/services/iscra>

Titolo: Quantum mechanical modelling of quinoline drugs

Acronimo: QUADRUG

Grant number: HP10CCQHFC

Inizio-termini: Friday, 10 October, 2014 to Friday, 10 July, 2015

CPU core hours equivalenti: 10 000

Ammontare monetario equivalente: 1 500 €

Il mio ruolo: PI

Pubblicazioni: P6, P9, O4, O6, A26

Descrizione: Determinare su base quantitativa le proprietà farmacoforiche che determinano la capacità di antimalarici 4-amminochinolinici di legare l'eme.

(F5) Istituzione: CINECA Italian supercomputing centre

Iniziativa: Interdisciplinary Laboratory for Advanced Simulations (LISA)

Webpage: <http://www.hpc.cineca.it/services/lisa>

Titolo: Quantum mechanical investigation of active TiO₂-based interfaces

Acronimo: SURGREEN

Grant number: HPL13PHG19

Inizio-termini: Wednesday, 21 May, 2014 to Thursday, 21 May, 2015

CPU core hours equivalenti: 180 000

Ammontare monetario equivalente: 27 000 €

Il mio ruolo: Co-proposer

Pubblicazioni: O10, O12, A15, A18, A27

Descrizione: Simulazione di molecole adsorbite su titania; simulazione di sistemi multifasici titania/metallo; Simulazioni semiclassiche GPU per riprodurre effetti quantistici su sistemi complessi.

(F6) Istituzione: CINECA Italian supercomputing centre

Iniziativa: Interdisciplinary Laboratory for Advanced Simulations (LISA)

Webpage: <http://www.hpc.cineca.it/services/lisa>

Titolo: Development of novel materials for pollutant remediation through quantum and semiclassical computational methods

Acronimo: MATGREEN

Grant number: LIS1301030

Inizio-termini: Wednesday, 1 May, 2013 to Wednesday, 30 April, 2014

CPU core hours equivalenti: 112 000 (Fermi) + 56 000 (PLX-Eurora)

Ammontare monetario equivalente: 25 200 €

Il mio ruolo: Co-proposer

Pubblicazioni: A36, A39

Descrizione: Sviluppo di nanofotocatalizzatori a base TiO₂ per la degradazione sostenibile di inquinanti organici volatili (VOC) tramite luce solare.

2. Tempo-macchina presso grandi facilities

L'approvazione del progetto con l'assegnazione di tempo macchina è subordinata ad un giudizio di merito da parte di un panel di valutazione composto da esperti internazionali, in competizione con altri proposals nello stesso ambito di ricerca. Oltre al tempo macchina, ESRF ed ELETTRA prevedono il finanziamento di tutte le spese di viaggio e soggiorno. Il costo equivalente di ciascun "grant" è stato stimato moltiplicando l'ammontare totale degli shifts sperimentali (1 shift = 8 ore) con un costo fisso di 3600 € per shift (Industrial Research at NSLS-II, 2014, <https://www.bnl.gov/ps/industry/files/pdf/NSLS-II-Industry-Workshop-White-Paper-2014.pdf>, pag. 9). Equivalente monetario di tutti i progetti vinti: ≈ 530 k€.

(S1) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR

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

Beamline / Laboratory: ID26

Grant number: Proposal 78609, CH-5490

- Inizio-termine: 30/05/2018-05/06/2018
Shifts ottenuti: 18
Ammontare monetario equivalente: 54 800 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: 0 (1 articolo in preprazione)
Descrizione: Confermare i nostri precedenti risultati XAS sul complesso eme:clorochina ad un livello di accuratezza inedito; Studiare per la prima volta la struttura elettronica dello ione Fe in complessi eme:4-amminochinoline.
- (S2) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Probing local and long-range structure of N-doped TiO₂-based composite (TiO₂, Sn/SnO₂) materials for advanced photo-electrochemical applications
Grant number: Proposal 76293, MA-3713
Beamline / Laboratory: ID26 / BM08
Inizio-termine: 03/05/2018 - 07/05/2018
Shifts ottenuti: 12
Ammontare monetario equivalente: 43 200 €
Il mio ruolo: Co-proposer
Pubblicazioni: 02 (1 articolo in preparazione)
Descrizione: Determinazione della composizione di fase e della struttura a lungo raggio di nanopolveri di TiO₂ drogate N e Sn tramite HR-XRPD; esplorare le regioni EXAFS di Sn e Ti, e L₁ di Sn, per scoprire eventuali distorsioni locali nella geometria di coordinazione del metallo in funzione della quantità di drogante.
- (S3) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Unveiling interactions of 4-aminoquinoline antimalarials with heme in solution.
Grant number: Proposal 51210, CH-4861
Beamline / Laboratory: BM26A
Inizio-termine: December, 8-11 2016
Shifts ottenuti: 9
Ammontare monetario equivalente: 32 400 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: 01, P1, P2 (+1 articolo in preparazione)
Descrizione: Investigazione EXAFS di un passaggio chiave del meccanismo di riconoscimento molecolare tra l'antimalarico piperachina e l'eme libero in soluzione.
- (S4) Istituzione: Institut Laue Langevin (ILL), Grenoble, FR
Titolo: Mapping complex hydrogen-bonded networks in quinoline-based antimalarial drugs.
Grant number: 5-12-319
Beamline / Laboratory: D19 (neutron diffraction experiment)
Inizio-termine: September, 08-15, 2015
Shifts ottenuti: 18
Ammontare monetario equivalente: 64 800 € [assumendo che 1 shift di ILL sia equivalente a 1 di ESRF]
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: 0 (1 articolo in preparazione)
Descrizione: Investigazione strutturale del sistema di legami a idrogeno in cristalli singoli del farmaco antimalarico clorochina a bassa T (fino a 100 K).
- (S5) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Unveiling interactions of 4-aminoquinoline antimalarials with haeme in solution.
Grant number: Proposal 36126, CH-4370
Beamline / Laboratory: BM26A
Inizio-termine: March, 5-8 2015
Shifts ottenuti: 9
Ammontare monetario equivalente: 32 400 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: A26, O4, O6, P6
Descrizione: Investigazione EXAFS di un passaggio chiave del meccanismo di riconoscimento molecolare tra l'antimalarico clorochina e l'eme libero in soluzione.

- (S6) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Progress in the understanding of structural and electronic properties of codoped N,Nb-TiO₂ nanopowders as transparent conducting oxides for optoelectronic applications
Grant number: Proposal 32044, MA-1979
Beamline / Laboratory: SNBL - BM01B
Inizio-termini: February, 26-March, 1, 2014
Shifts ottenuti: 9
Ammontare monetario equivalente: 32 400 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: A36
Descrizione: Studio della struttura cristallografica e delle distorsioni locali nella geometria di coordinazione di Nb e Ti in polveri nanostrutturate a base titania.
- (S7) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Explaining the photocatalytic improvement of Ag-N codoped bulky nano-TiO₂ by in-situ XAFS and HRXRPD measurements
Grant number: Proposal 30499, MA-1781
Beamline / Laboratory: SNBL - BM01B
Inizio-termini: April, 24-29, 2013
Shifts ottenuti: 9
Ammontare monetario equivalente: 32 400 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: A39 + 1 articolo in preparazione
Descrizione: Investigazione della struttura cristallografica e delle distorsioni locali della geometria di coordinazione di Ag e Ti in fotocatalizzatori nanostrutturati a base titania.
- (S8) Istituzione: Elettra, Trieste, IT
Titolo: Investigation of electronic features of TiO₂:Nb,N transparent conducting films by high-resolution and resonant photoelectron spectroscopies.
Grant number: 20130115
Beamline / Laboratory: Material Science Beamline
Inizio-termini: September, 16-20, 2013
Shifts ottenuti: 12
Ammontare monetario equivalente: 43 200 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: A39
Descrizione: Studio della struttura elettronica superficiale di film sottili a base titania drogati con Nb e N in funzione della strategia di sintesi; Investigazione della concentrazione degli stati di ossidazione degli ioni droganti sulla superficie; Determinazione del gradiente di concentrazione dei droganti in funzione dello spessore del film.
- (S9) Istituzione: Elettra, Trieste, IT
Titolo: Structural and electronic characterization of chemisorbed species on TiO₂ transparent films: a combined XPS and NEXAFS study.
Grant number: 2013115
Beamline / Laboratory: Material Science Beamline
Inizio-termini: October, 07-12, 2013
Shifts ottenuti: 15
Ammontare monetario equivalente: 54 000 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: A18, A39
Descrizione: Studio delle interazioni tra molecole chemisorbite e superficie in film sottili a base TiO₂; Determinazione dei cambiamenti nella struttura elettronica e nelle proprietà di adsorbimento di molecole chemisorbite alla superficie del film; Studio dei possibili eventi di degradazione di tali molecole adsorbite.
- (S10) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Correlating the structural and magnetic phase diagram of GdBaCo₂O_{5+δ} as a function of T and delta by means of high-resolution X-ray powder diffraction.

Grant number: Proposal 24599, 01-02-916
Beamline / Laboratory: SNBL-BM01A
Inizio-termine: February, 5-8 2011
Shifts ottenuti: 6
Ammontare monetario equivalente: 21 600 €
Il mio ruolo: Co-proposer
Pubblicazioni: A40, A51
Descrizione: Investigazione della struttura dell'ossido magnetoresistente $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$.

- (S11) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Determination of Co electronic states by using exact structural determinations.
Grant number: Proposal 24333, HE-3510
Beamline / Laboratory: ID31
Inizio-termine: January, 26- February, 1 2011 and February, 7-8 2011
Shifts ottenuti: 18
Ammontare monetario equivalente: 64 800 €
Il mio ruolo: Co-proposer
Pubblicazioni: A40, A51
Descrizione: Investigazione cristallografica dell'ossido magnetoresistente $\text{GdBaCo}_2\text{O}_5$ a basse T, volte a mappare le transizioni di fase.
- (S12) Istituzione: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, FR
Titolo: Probing nanoscale structural inhomogeneities in $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ by means of the real space analysis of high resolution X-ray powder diffraction
Grant number: Proposal 21986, HE-3241
Beamline / Laboratory: ID31
Inizio-termine: October, 28-November, 2 2009
Shifts ottenuti: 15
Ammontare monetario equivalente: 54 000 €
Il mio ruolo: Co-proposer
Pubblicazioni: A40, A51
Descrizione: Studio della struttura locale e a medio raggio di $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ in funzione di δ e T tramite la Funzione di Distribuzione a Coppie, allo scopo di verificare disomogeneità alla nanoscala che determinano la risposta magnetoresistente.

3. Grant e riconoscimenti monetari

- (G1) Istituzione: Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca, Italy
Iniziativa: Bando FFABR 2017 (Fondo di Finanziamento Annuale per le attività Base per la Ricerca)
Inizio-termine: Aprile, 2018- Aprile, 2020
Importo finanziato: 3 000 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: Progetto ancora in corso.
Descrizione: Si tratta di un grant erogato su base competitiva, per titoli, a livello Nazionale a Professori e Ricercatori universitari. Nella valutazione ho ottenuto un punteggio di 89.
- (G2) Istituzione: Università degli Studi di Milano, Milano, Italy
Iniziativa: Piano di sostegno alla Ricerca, LINEA 1, Azione B
Titolo: Understanding structure-function relationships in 4-aminoquinoline drugs: an experimental and theoretical route toward novel antimalarials (NOVAQ).
Inizio-termine: November 2016- November, 2018
Importo finanziato: 9 250 €
Il mio ruolo: PI
Pubblicazioni: A2 (+ 1 articolo in preparazione).
Descrizione: Determinare su base quantitativa le proprietà farmacoforiche alla base della capacità di legare l'eme di alcuni farmaci antimalarici 4-amminochinolinici; Predire quali modificazioni chimiche della struttura molecolare amminochinolinica possono disattivare il meccanismo di resistenza evoluto dal parassita della malaria, preservando la funzionalità del farmaco.
- (G3) Istituzione: Università degli Studi di Milano, Milano, Italy
Iniziativa: Piano di sostegno alla Ricerca, LINEA 1, Azione A

Titolo: Unveiling the mode of action of hematin crystallization inhibitors: an experimental and theoretical approach towards new antimalarial drugs.

Inizio-termini: February, 2014- February, 2015

Importo finanziato: 6 800 €

Il mio ruolo: PI

Pubblicazioni: A20, A21, A26, O4, O6, O11, P6, P9

Descrizione: Ottenere informazioni sulle interazioni non-covalenti che sono responsabili delle proprietà farmacoforiche di cloroquina e piperachina, due tipici farmaci antimalarici 4-amminochinolinici.

(G4) Istituzione: Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca, Italy

Iniziativa: PUR 10 % - anno 2009

Titolo: Experimental and Theoretical Charge Density in Molecular Crystals: Methods and Models

Inizio-termini: 2009- 2012

Importo finanziato: 4 500 €

Il mio ruolo: PI

Pubblicazioni: A39, A46, A51, A53

Descrizione: Si tratta di fondi erogati dal Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica a giovani ricercatori (< 40 anni) nell'ambito del loro programma di ricerca.

(G5) Istituzione: Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca, Italy

Iniziativa: PUR 2008 - ex FIRST

Titolo: Experimental and Theoretical Charge Density in Molecular Crystals: Methods and Models

Inizio-termini: 2008- 2011

Importo finanziato: 8 400 €

Il mio ruolo: membro del progetto (titolare: prof. Destro; in seguito al suo pensionamento, sono subentrato come titolare)

Pubblicazioni: A52, A56, A58.

Descrizione: L'obiettivo primario di questo progetto è stata l'investigazione del legame chimico e delle interazioni intermolecolari in cristalli molecolari dal punto di vista della densità elettronica, allo scopo di ottenere informazioni sul processo di (auto-) riconoscimento molecolare e del campo cristallino sulle proprietà molecolari.

4. Responsabilità di studi e ricerche scientifiche affidati da qualificate istituzioni pubbliche o private

(M1) Cliente: IEO (European Institute of Oncology)

Progetto: Cristallizzazione e analisi tramite diffrazione di raggi X su cristallo singolo di un agente antitumorale.

Periodo: Aprile-Giugno 2010

Corrispettivo: 370 €

(M2) Cliente: Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (Università degli Studi di Milano)

Progetto: Selezione e analisi tramite diffrazione di raggi X su cristallo singolo di un composto bioattivo.

Periodo: Settembre-ottobre 2012

Corrispettivo: 350 €

(M3) Cliente: DEFENS (Università degli Studi di Milano)

Progetto: Selezione e analisi tramite diffrazione di raggi X su cristallo singolo di un composto bioattivo.

Periodo: Febbraio 2013

Corrispettivo: 390 €

Data

14/03/2019

Luogo

Milano