

## **ALLEGATO B**

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 9 posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera b) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 03/A2 , settore scientifico-disciplinare CHIM/02 presso il Dipartimento di BIOTECNOLOGIE MEDICHE E MEDICINA TRASLAZIONALE, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 32 del 21/04/2020) Codice concorso 4344

## **[Nome e cognome] CURRICULUM VITAE**

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

<b>COGNOME</b>	RAMPINO
<b>NOME</b>	SERGIO
<b>DATA DI NASCITA</b>	3 MAGGIO 1984

**INSERIRE IL PROPRIO CURRICULUM  
(non eccedente le 30 pagine)**

Data

20/05/2020

Luogo

Pisa

# Curriculum scientifico professionale

Sergio Rampino

## Indice

1 Istruzione . . . . .	1
2 Posizioni di ricerca . . . . .	2
3 Ricerca all'estero . . . . .	3
4 Abilitazione Scientifica Nazionale . . . . .	4
5 Sinossi dell'attività di ricerca . . . . .	4
6 Pubblicazioni scientifiche . . . . .	5
7 Comunicazioni scientifiche . . . . .	9
8 Progetti di ricerca . . . . .	13
9 Partecipazione spin off . . . . .	16
10 Divulgazione scientifica . . . . .	16
11 Riconoscimenti, premi e altri finanziamenti . . . . .	16
12 Sviluppo software presso enti di ricerca . . . . .	17
13 Attività didattiche e di supervisione . . . . .	19
14 Incarichi accademici . . . . .	21
15 Scuole di formazione europee e internazionali . . . . .	24
16 Organizzazione congressi . . . . .	24
17 Affiliazione a società scientifiche . . . . .	25
18 Attività editoriali . . . . .	25
19 Competenze linguistiche e informatiche . . . . .	25

## 1 Istruzione

- **Laurea triennale in Lettere, 110/110 cum laude**  
Università degli Studi di Perugia (Italia)  
Tesi: *Lettura di Falsetto*  
Relatori: *Prof. Massimiliano Tortora, Prof. Silvia Chessa*  
Data: 5 novembre 2012
- **Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche**  
Università degli Studi di Perugia (Italia)  
Tesi: *Workflows and data models for atom diatom quantum reactive scattering calculations on the Grid*  
Supervisore: *Prof. Antonio Laganà*  
Data: 21 febbraio 2011
- **Abilitazione alla professione di Chimico Sezione A**  
Conseguita presso Università degli Studi di Perugia nella seconda sessione dell'anno 2007 con la votazione di 178/240
- **Laurea specialistica in Scienze Chimiche, 110/110 cum laude**  
Titolo a validità europea di **European Master in Theoretical Chemistry and Computational**

### Modelling (TCCM)

Università degli Studi di Perugia (Italia)

Tesi: *Spacecraft reentry modeling: exact quantum calculations for the reaction  $N + N_2$*

Relatori: Prof. Antonio Laganà, Prof. Antonio Aguilar

Data: 16 luglio 2007

- **Laurea triennale in Chimica, 110/110 cum laude**

Università degli Studi di Perugia (Italia)

Tesi: *Tecniche tempo dipendenti per calcoli di scattering quantistico: la reazione collineare  $Cl + H_2 \rightarrow HCl + H$*

Relatore: Prof. Antonio Laganà

Data: 4 novembre 2005

- **Maturità classica, 100/100**

Liceo Classico Statale 'V. Lilla', Francavilla Fontana (Italia)

Data: anno 2002

## 2 Posizioni di ricerca

Attività pluriennale di ricerca presso 3 centri tra Università e Enti di ricerca italiani nel campo dello sviluppo e applicazione di metodi computazionali per lo studio di proprietà di struttura e dinamica di sistemi chimici di diversa complessità (dalle reazioni elementari in fase gas alla chimica di coordinazione in catalisi omogenea e alle proprietà elettroniche degli elementi superpesanti). Si rimanda alla Sezione 5 per una descrizione più circostanziata dell'attività di ricerca.

- **Ricercatore a tempo determinato** ai sensi dell'art. 24, comma 3, lett. a) della Legge 240/2010, settore concorsuale: 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, Settore scientifico disciplinare: CHIM/02 - Chimica Fisica  
Titolo progetto: *Sviluppo e applicazione di nuove strategie computazionali per lo studio di proprietà strutturali, dinamiche e spettroscopiche di sistemi molecolari in fase gassosa ed in soluzione*  
Ente: Scuola Normale Superiore, Pisa (Italia)  
Da: 2 ottobre 2017 - A: 1 ottobre 2020
- **Assegno di ricerca** ai sensi dell'art. 22 della Legge 240/2010 nell'ambito del progetto UE 7 PQ - ERC "Development of a Research Environment for Advanced Modeling of Soft Matter", acronimo DREAMS, Grant Agreement Number 320951  
Titolo progetto: *Sviluppo di algoritmi di dinamica quantistica per sistemi a dimensionalità elevata*  
Responsabile: Prof. Vincenzo Barone  
Ente: Scuola Normale Superiore, Pisa (Italia)  
Da: 12 maggio 2016 - A: 1 ottobre 2017
- **Assegno di ricerca** ai sensi dell'art. 22 della Legge 240/2010 nell'ambito del progetto FIRB-FUTURO in RICERCA 2010 "Nuovi catalizzatori molecolari di Au(I): da know-how a know-why", acronimo AuCat, project no. RBFR1022UQ  
Titolo progetto: *Sviluppo computazionale di nuovi metodi teorici basati sull'approccio relativistico a quattro componenti e sue applicazioni in sistemi metallorganici contenenti metalli pesanti*  
Responsabile: Dr. Leonardo Belpassi  
Ente: Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari - UOS Perugia, Consiglio Nazionale delle Ricerche (Italia)  
Da: 11 febbraio 2013 - A: 10 febbraio 2016

- **Assegno di ricerca** ai sensi dell'art. 51, comma 6 della Legge 449/1997  
 Titolo progetto: **Workflow per processi reattivi** (tematica: sviluppo di metodiche computazionali per lo studio di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi reattivi in fase gas)  
 Responsabile: Prof. Antonio Laganà  
 Ente: Università degli Studi di Perugia (Italia)  
 Da: 15 novembre 2010 - A: 14 novembre 2011

### 3 Ricerca all'estero

Soggiorni di ricerca in 7 sedi estere presso Università, enti di ricerca e centri di calcolo, su progetti finanziati da enti e programmi europei e nazionali quali COST - European cooperation in Science and Technology (<http://www.cost.eu/>), HPC-Europa (<http://www.hpc-europa.eu>), Ministerio de Ciencia e Innovación (Spagna) per un totale di 313 giorni (circa 10 mesi e mezzo effettivi).

- **Edinburgh Parallel Computing Centre/School of Chemistry, University of Edinburgh (Edinburgh, United Kingdom)**  
 Progetto: *Combined orbital-space/real-space analysis of the electron-charge rearrangement on parallel architectures*  
 Identificativo progetto: HPC-Europa3, code HPC17SA29X  
 Scientific host: Prof. Carole Morrison  
 Da: 18 luglio 2019 - A: 17 agosto 2019
- **ACK Cyfronet/University of Science and Technology (Cracow, Poland)**  
 Progetto: *Reduced dimensionality quantum mechanical thermal rate coefficients of hydroxyl radical reactions*  
 Identificativo progetto: Azione COST CM0901, STSM n. 7513  
 Scientific host: Dr. Mariusz Sterzel (ACK Cyfronet)  
 Da: 21 gennaio 2011 - A: 14 febbraio 2011
- **GENCI-CINES/École Normale Supérieure (Paris, France)**  
 Progetto: *MPI approach to the propagation of initial state selected wavepackets using non-orthogonal coordinates*  
 Identificativo progetto: HPC Europa-2 Application n. 410 (HPC08QPA5C)  
 Scientific host: Dr. Irene Burghardt (École Normale Supérieure)  
 Da: 19 maggio 2010 - A: 5 luglio 2010
- **Barcelona Supercomputing Centre/Universidad del País Vasco (Barcelona, Spain)**  
 Progetto: *Porting of a time-independent quantum reactive scattering program*  
 Identificativo progetto: MareNostrum Activity QCM-2010-1-0009  
 Scientific host: Prof. Ernesto García (Universidad del País Vasco)  
 Da: 21 aprile 2010 - A: 14 maggio 2010
- **University of Bristol, School of Chemistry (Bristol, United Kingdom)**  
 Progetto: *Wavepacket dynamics in the bond-length and bond-order space in the grid-empowered molecular simulator*  
 Identificativo progetto: Azione COST D37, STSM n. 5764  
 Scientific host: Prof. Gabriel G. Balint-Kurti (University of Bristol)  
 Da: 15 febbraio 2010 - A: 28 marzo 2010
- **University of Toulouse, Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (Toulouse, France)**  
 Progetto: *The issue of interoperability in GEMS: designing a D5Cost data model*  
 Identificativo progetto: Azione COST D37, STSM n. 5218  
 Scientific host: Prof. Stefano Evangelisti (University of Toulouse)  
 Da: 1 novembre 2009 - A: 12 dicembre 2009

- **Edinburgh Parallel Computing Centre/School of Chemistry, University of Edinburgh (Edinburgh, United Kingdom)**  
Progetto: *Time dependent quantum scattering using non orthogonal coordinates*  
Identificativo progetto: HPC Europa-2 Application n. 12 (HPC08M9B19)  
Scientific host: *Dr. Kenneth Lawley*  
Da: 1 febbraio 2009 - A: 3 marzo 2009 e Da: 15 giugno 2009 - A: 23 luglio 2009
- **University of Zürich, Organic Chemistry Institute (Zürich, Switzerland)**  
Progetto: *Scientific workflows for GEMS: the grid-empowered molecular simulator*  
Identificativo progetto: Azione COST D37, STSM n. 4438  
Scientific host: *Prof. Kim Baldridge (University of Zürich)*  
Da: 24 aprile 2009 - A: 24 maggio 2009

## 4 Abilitazione Scientifica Nazionale

- Abilitazione Scientifica Nazionale (tornata 2016, quinto quadrimestre, domanda 76964) in Seconda Fascia per il Settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche conseguita il 31 luglio 2018 e valida dal 31 luglio 2018 al 31 luglio 2027
- Abilitazione Scientifica Nazionale (tornata 2018, terzo quadrimestre, domanda 18769) in Seconda Fascia per il Settore concorsuale 03/B1 - Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici conseguita il 20 dicembre 2019 e valida dal 20 dicembre 2019 al 20 dicembre 2028
- Abilitazione Scientifica Nazionale (tornata 2018, terzo quadrimestre, domanda 18807) in Seconda Fascia per il Settore concorsuale 03/B2 - Fondamenti Chimici delle Tecnologie conseguita il 13 gennaio 2020 e valida dal 13 gennaio 2020 al 13 gennaio 2029

## 5 Sinossi dell'attività di ricerca

(i numeri in parentesi quadre si riferiscono ai lavori elencati in Sezione 6)

La mia attività di ricerca si sviluppa lungo tre direttive che attraversano aree diverse della chimica teorica e computazionale e coinvolgono sia sviluppo che applicazione di metodi computazionali per il calcolo di proprietà di struttura e di dinamica di sistemi chimici di varia complessità e interesse applicativo.

### 1. Dinamica delle reazioni chimiche

Il mio lavoro di dottorato è stato centrato sullo sviluppo computazionale del simulatore **GEMS** (Grid Empowered Molecular Simulator) [35,39,41,43] per lo studio di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi reattivi in fase gas a partire dai primi principi. GEMS si articola in tre moduli: i) struttura elettronica ii) dinamica in fase gas iii) calcolo delle osservabili. L'interoperabilità tra i tre moduli è facilitata dall'adozione di un formato di dati comune, il **Q5Cost** [32], dotato di relativa libreria per accesso e manipolazione dati, e sviluppato congiuntamente da un team di ricercatori europei. L'implementazione di GEMS ha portato a numerosi studi su sistemi reattivi in fase gas tra cui  $H + H_2$  [15],  $N + N_2$  [40,42,49,50,51],  $O + O_2$  [44,48],  $Li + HF$  [30]. In questo ambito di ricerca, su un versante più teorico e di sviluppo, ho esplorato la possibilità di adottare coordinante non convenzionali, come le Bond Order (BO), nella soluzione di problemi di dinamica quantistica reattiva [36]. Più di recente, ho sviluppato personalmente lo schema space-reduced bond order (SRBO) [21] e un relativo codice

computazionale che lo implementa **Pestk** (cfr. Sezione 12), per il campionamento dello spazio delle configurazioni in problemi di fitting di superfici di energia potenziale. Tale schema è stato adottato con successo in casi di studio di rilevanza astrochimica [17,19,20].

## 2. Struttura elettronica relativistica

Dal 2013 al 2016 ho lavorato allo sviluppo e mantenimento del codice di struttura elettronica relativistica a quattro componenti **BERTHA** [29,33]. In particolare, ho progettato e curato personalmente un'implementazione parallela basata sulla distribuzione tra processi concorrenti del carico non solo di lavoro, ma anche di memoria. Tale implementazione ha permesso di abbattere qualsiasi barriera dovuta all'elevato costo computazionale associato col trattamento relativistico a quattro componenti, estendendo così enormemente il campo di applicabilità di tale trattamento e facendo di BERTHA uno tra i più efficienti codici relativistici disponibili. Applicazioni in quest'area includono benchmark DFT su reazioni catalizzate da Au(I) [31], l'accertamento del carattere chimico degli elementi superpesanti di recentissima scoperta e classificazione [24], e la caratterizzazione di fullereni duali di Au [18] (lavoro che si è aggiudicato l'immagine di copertina e una pagina dedicata con profilo degli autori sulla rivista *Chemistry - A European Journal*).

## 3. Analisi del legame chimico

Un terzo e proficuo ramo della mia ricerca è rivolto allo studio del legame chimico tramite l'analisi della differenza di densità elettronica tra uno sistema legato e un sistema di riferimento non interagente. In questo ambito, ho sviluppato insieme con altri lo schema di analisi natural orbitals for chemical valence/charge-displacement (NOCV/CD) [26], e scritto autonomamente un codice computazionale che lo implementa [16]. È inoltre in questo contesto che ho sviluppato autonomamente i software **Cubes** [27], un pacchetto di analisi e manipolazione di orbitali e densità elettroniche, e **Waverley**, un programma di struttura elettronica di base capace di calcolare e maneggiare quantità basate su funzioni di tipo gaussiano GTO (cfr. Sezione 12). Il metodo NOCV/CD si è rivelato estremamente potente per uno studio qualitativo e quantitativo delle proprietà di legame in chimica di coordinazione (come i trasferimenti di carica di donazione e retro-donazione nei complessi organometallici) e nei complessi legati in modo non covalente, e ha portato, nel giro di pochi anni, a un discreto numero di pubblicazioni su riviste scientifiche di chimica generale ad alto fattore d'impatto quali *Angewandte Chemie International Edition* [10,9], *Chemical Communications* [12] e *Chemical Science* [22]. Ulteriori sviluppi in questa promettente direzione sono stati l'esplorazione dell'utilizzo di tecnologia di realtà virtuale immersiva per l'analisi del legame chimico [11] (lavoro che si è aggiudicato l'immagine di copertina, di prossima pubblicazione, sulla rivista *Journal of Computational Chemistry*) e l'estensione delle metodologie di analisi del legame al formalismo relativistico a quattro componenti [13] e allo studio delle eccitazioni elettroniche.

## 6 Pubblicazioni scientifiche

Autore di 51 pubblicazioni scientifiche, 33 volte autore corrispondente, 19 volte primo autore, 18 volte sia primo autore che autore corrispondente, 2 volte autore singolo.

(<sup>f</sup>first author, \*corresponding author, <sup>s</sup>sole author)

1. Martino M, Salvadori A, Lazzari F, Paoloni L, Nandi S, Mancini G, Barone V, Rampino S\*, **Chemical Promenades: Exploring Potential-energy Surfaces with Immersive Virtual Reality**, *Journal of Computational Chemistry* 41, 1310-1323 (2020), DOI: 10.1002/JCC.26172
2. Nandi S, Ballotta B, Rampino S\*, Barone V, **A general user-friendly tool for kinetic calculations of multi-step reactions within the Virtual Multifrequency Spectrometer project**, *Applied Sciences* 19, 1872, 14 pp. (2020), DOI: 10.3390/app10051872

3. Paoloni L, Rampino S\*, Barone V, **Potential-energy surfaces for ring-puckering motions of flexible cyclic molecules through Cremer-Pople coordinates: computation, analysis and fitting**, *Journal of Chemical Theory and Computation* 15, 4280-4294 (2019), DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00363
4. De Santis M, Rampino S, Storchi L, Belpassi L, Tarantelli F, **The chemical bond and sd hybridization in coinage metal(I) cyanides**, *Inorganic Chemistry* 58, 11716-11729 (2019), DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b01694
5. Licari D, Rampino S\*, Barone V, **Machine learning of potential-energy surfaces within a bond-order sampling scheme**, *Lecture Notes in Computer Science* 11624, 388-400 (2019), DOI: 10.1007/978-3-030-24311-1\_28
6. Nandi S, Calderini D, Bloino J, Rampino S\*, Barone V, **A modern-Fortran program for chemical kinetics on top of anharmonic vibrational calculations**, *Lecture Notes in Computer Science* 11624, 401-412 (2019), DOI: 10.1007/978-3-030-24311-1\_29
7. Lupi J, Martino M, Salvadori A, Rampino S\*, Mancini G, Barone V, **Virtual Reality Tools for Advanced Modeling**, *AIP Conference Proceedings*, 2145, 020001, 6 pp. (2019), DOI: 10.1063/1.5123562
8. Patti A, Pedotti S, Mazzeo G, Longhi G, Abbate S, Paoloni L, Bloino J, Rampino S, Barone V, **Ferrocenes with simple chiral substituents: an in-depth theoretical and experimental VCD and ECD study**, *Physical Chemistry Chemical Physics* 21, 9419-9432 (2019), DOI: 10.1039/C9CP00437H
9. Obenchain DA, Spada L, Alessandrini S, Rampino S, Herbers S, Tasinato N, Mendolicchio M, Kraus P, Gauss J, Puzzarini C, Grabow J-U, Barone V, **Unveiling the sulfur-sulfur bridge: accurate structural and energetic characterization of a homochalcogen intermolecular bond**, *Angewandte Chemie International Edition* 57, 15822-15826 (2018), DOI: 10.1002/anie.201810637, *Angewandte Chemie* 130, 16048-16052 (2018), DOI: 10.1002/ange.201810637
10. Li W, Spada L, Tasinato N, Rampino S, Evangelisti L, Gualandi A, Cozzi PG, Melandri S, Barone V, Puzzarini C, **Theory meets experiment for noncovalent complexes: the puzzling case of pnictogen interactions**, *Angewandte Chemie International Edition* 57, 13853-13857 (2018), DOI: 10.1002/anie.201807751, *Angewandte Chemie* 130, 14049-14053 (2018), DOI: 10.1002/ange.201807751
11. Salvadori A, Fusè M, Mancini G, Rampino S\*, Barone V, **Diving into chemical bonding: an immersive analysis of the electron charge rearrangement through virtual reality**, *Journal of Computational Chemistry* 39, 2607-2617 (2018), DOI: 10.1002/jcc.25523 (Cover picture: 10.1002/jcc.25044)
12. Fusè M, Rimoldi I, Facchetti G, Rampino S\*, Barone V, **Exploiting coordination geometry to selectively predict the  $\sigma$ -donor and  $\pi$ -acceptor abilities of ligands: a back-and-forth journey between electronic properties and spectroscopy**, *Chemical Communications* 54, 2397-2400 (2018), DOI: 10.1039/C7CC09627E
13. De Santis M, Rampino S\*, Quiney HM, Belpassi L, Storchi L, **Charge-displacement analysis via natural orbitals for chemical valence in the four-component relativistic framework**, *Journal of Chemical Theory and Computation* 14, 1286-1296 (2018), DOI: 10.1021/acs.jctc.7b01077
14. Faginas Lago N, Laganà A, Rampino S, **Foreword**, *VIRT&L-COMM* 14, 14-2018.1, 2 pp. (2018), ISSN: 2279-8773
15. Rampino S<sup>f</sup>\*, Storchi L, Laganà A, **Automated simulation of gas-phase reactions on distributed and cloud computing infrastructures**, *Lecture Notes in Computer Science* 10406, 60-73 (2017), DOI: 10.1007/978-3-319-62398-6\_5
16. Fusè M, Rimoldi I, Cesarotti E, Rampino S\*, Barone V, **On the relation between carbonyl stretching frequencies and the donor power of chelating diphosphines in nickel dicarbonyl complexes**, *Physical Chemistry Chemical Physics* 19, 9028-9038 (2017), DOI: 10.1039/C7CP00982H

17. Rampino S<sup>f\*</sup>, Suleimanov YV, **Thermal rate coefficients for the astrochemical process  $C + CH^+ \rightarrow C_2^+ + H$  by ring polymer molecular dynamics**, *The Journal of Physical Chemistry A* 120, 9887-9893 (2016), DOI: 10.1021/acs.jpca.6b10592
18. Trombach L, Rampino S, Wang L-S, Schwerdtfeger P, **Hollow gold cages and their topological relationship to dual fullerenes**, *Chemistry - A European Journal* 22, 8823-8834 (2016), DOI: 10.1002/chem.201601239 (Cover Picture: 10.1002/chem.201602144, Cover Profile: 10.1002/chem.201602148)
19. Rampino S<sup>f\*</sup>, Pastore M, Garcia E, Pacifici L, Laganà A, **On the temperature dependence of formation of  $C_2^+$  from  $C + CH^+$** , *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 460, 2368-2375 (2016), DOI: 10.1093/mnras/stw1116
20. Pacifici L, Pastore M, Garcia E, Laganà A, Rampino S<sup>\*</sup>, **A dynamics investigation of the  $C + CH^+ \rightarrow C_2^+ + H$  reaction on an *ab initio* bond-order like potential**, *The Journal of Physical Chemistry A* 120, 5125-5135 (2016), DOI: 10.1021/acs.jpca.6b00564
21. Rampino S<sup>f\*§</sup>, **Configuration-space sampling in potential energy surface fitting: a space-reduced bond-order grid approach**, *The Journal of Physical Chemistry A* 120, 4683-4692 (2016), DOI: 10.1021/acs.jpca.5b10018
22. Bistoni G, Rampino S<sup>\*</sup>, Scafuri N, Ciancaleoni G, Zuccaccia D, Belpassi L, Tarantelli F, **How  $\pi$  back-donation quantitatively controls the CO stretching response in classical and non-classical metal carbonyl complexes**, *Chemical Science* 7, 1174-1184 (2016), DOI: 10.1039/C5SC02971F
23. Althorpe SC, Beniwal V, Bolhuis PG, Brandão J, Clary DC, Ellis J, Fang W, Glowacki DR, Hele TJH, Jónsson H, Kästner J, Makri N, Manolopoulos DE, McKemmish LK, Menzl G, Miller III TF, Miller WH, Pollak E, Rampino S, Richardson JO, Richter M, Chowdhury PR, Shalashilin D, Tennyson J, Welsch R, **Fundamentals: general discussion (Reaction Rate Theory)**, *Faraday Discussions* 195, 139-169 (2016), DOI: 10.1039/C6FD90077A
24. Rampino S<sup>f\*</sup>, Storch L, Belpassi L, **Gold-superheavy-element interaction in diatomics and cluster adducts: a combined four-component Dirac-Kohn-Sham/ charge-displacement study**, *The Journal of Chemical Physics* 143, 024307, 8 pp. (2015), DOI: 10.1063/1.4926533
25. Urzúa-Leiva R A, Rampino S<sup>\*</sup>, Arratia-Perez R, Mosconi E, Pastore M, De Angelis F, **Thermal fluctuations on Förster resonance energy transfer in dyadic solar cell sensitizers: a combined *ab initio* molecular dynamics and TDDFT investigation**, *The Journal of Physical Chemistry C* 119, 16490-16499 (2015), DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b04921
26. Bistoni G, Rampino S<sup>\*</sup>, Tarantelli F, Belpassi L, **Charge-displacement analysis via natural orbitals for chemical valence: charge transfer effects in coordination chemistry**, *The Journal of Chemical Physics* 142, 084112, 9 pp. (2015), DOI: 10.1063/1.4908537
27. Rampino S<sup>f\*§</sup>, **CUBES: a library and a program suite for manipulating orbitals and densities**, *VIRT&L-COMM* 7, 7-2015.6, 2 pp. (2015), ISSN: 2279-8773
28. Laganà A, Manuali C, Pacifici L, Rampino S, Costantini A, **A new bottom up approach to the CMMST-VRE**, *VIRT&L-COMM* 7, 7-2015.8, 12 pp. (2015), ISSN: 2279-8773
29. Rampino S<sup>f\*</sup>, Belpassi L, Tarantelli F, Storch L, **Full parallel implementation of an all-electron four-component Dirac-Kohn-Sham program**, *Journal of Chemical Theory and Computation* 10, 3766-3776 (2014), DOI: 10.1021/ct500498m
30. Laganà A, Rampino S<sup>\*</sup>, **A grid empowered virtual versus real experiment for the barrierless  $Li + FH \rightarrow LiF + H$  reaction**, *Lecture Notes in Computer Science* 8579, 571-584 (2014), DOI: 10.1007/978-3-319-09144-0\_39



31. Ciancaleoni G, Rampino S, Zuccaccia D, Tarantelli F, Belanzoni P, Belpassi L, **An ab initio benchmark and DFT validation study on Gold(I)-catalyzed hydroamination of alkynes**, *Journal of Chemical Theory and Computation* 10, 1021-1034 (2014), DOI: 10.1021/ct400980w
32. Rossi E, Evangelisti S, Laganà A, Monari A, Rampino S, Verdicchio M, Baldrige K, Bendazzoli G L, Borini S, Cimiraglia R, Angeli C, Kallay P, Lüthi H P, Ruud K, Sanchez-Marin J, Scemama A, Szalay P, Tajti A, **Code Interoperability and standard Data Formats in Quantum Chemistry and Quantum Dynamics: the Q5/D5cost Data Model**, *Journal of Computational Chemistry* 35, 611-621 (2014), DOI: 10.1002/jcc.23492
33. Storchi L, Rampino S, Belpassi L, Tarantelli F, Quiney H, **Efficient parallel all-electron four-component Dirac-Kohn-Sham program using a distributed matrix approach II**, *Journal of Chemical Theory and Computation* 9, 5356-5364 (2013), DOI: 10.1021/ct400752s
34. Laganà A, Rampino S, **General Chemistry on ICT Supports for School Teachers (TFA 2011-2012)**, *VIRT&L-COMM* 3, 3-2013.2, 1 p. (2013), ISSN: 2279-8773
35. Rampino S<sup>f\*</sup>, Faginas Lago N, Laganà A, Huarte-Larrañaga F, **An extension of the Grid Empowered Molecular Simulator to quantum reactive scattering**, *Journal of Computational Chemistry* 33, 708-714 (2012), DOI: 10.1002/jcc.22878
36. Rampino S<sup>f\*</sup>, Laganà A, **Bond Order uniform grids for quantum reactive scattering**, *International Journal of Quantum Chemistry* 112, 1818-1828 (2012), DOI: 10.1002/qua.23058
37. Laganà A, Manuali C, Rampino S, Costantini A, Rossi E, Carpené M, Ghiselli A, Cecchi M, **High Performance Grid Computing: getting HPC and HTC all together**, *Proceedings of the EGI Community Forum 2012 / EMI Second Technical Conference*, PoS(EGICF12-EMITC2)144 (2012), ISSN: 1824-8039
38. Costantini A, Murri R, Maffioletti S, Rampino S, Laganà A, **A Grid execution model for Computational Chemistry Applications using the GC3Pie framework and AppPot**, *Proceedings of the EGI Community Forum 2012 / EMI Second Technical Conference*, PoS(EGICF12-EMITC2)058 (2012), ISSN: 1824-8039
39. Rampino S<sup>f\*</sup>, Monari A, Evangelisti S, Rossi E, Laganà A, **A priori modeling of chemical reactions on computational grid platforms: workflows and data models**, *Chemical Physics* 398, 192-198 (2012), DOI: 10.1016/j.chemphys.2011.04.028
40. Rampino S<sup>f\*</sup>, Pirani F, Garcia E, Laganà A, **A study of the impact of long range interactions on the reactivity of N + N<sub>2</sub> using the Grid Enabled Molecular Simulator**, *International Journal of Grid and Web Services* 6, 196-212 (2010), DOI: 10.1504/IJWGS.2010.033792
41. Laganà A, Costantini A, Gervasi O, Faginas Lago N, Manuali C, Rampino S, **COMPChem: progress towards GEMS a Grid Empowered Molecular Simulator and beyond**, *Journal of Grid Computing* 8, 571-586 (2010), DOI: 10.1007/s10723-010-9164-x
42. Rampino S<sup>f\*</sup>, Garcia E, Pirani F, Laganà A, **Accurate quantum dynamics on Grid platforms: some effects of long range interactions on the reactivity of N + N<sub>2</sub>**, *Lecture Notes in Computer Science* 6019, 1-12 (2010), DOI: 10.1007/978-3-642-12189-0\_1
43. Manuali C, Laganà A, Rampino S, **GriF: a Grid Framework for a Web Service approach to reactive scattering**, *Computer Physics Communications* 181, 1179-1185 (2010), DOI: 10.1016/j.cpc.2010.03.001
44. Rampino S<sup>f\*</sup>, Skouteris D, Laganà A, **Microscopic branching processes: the O + O<sub>2</sub> reaction and its relaxed potential representations**, *International Journal of Quantum Chemistry* 110, 358-367 (2010), DOI: 10.1002/qua.22199

45. Rampino S<sup>f\*</sup>, Burghardt I, Laganà A, **Bond Order coordinates for quantum reactive scattering: diatomic eigenvalue problem for collinear H + H<sub>2</sub>**, *Science and Supercomputing in Europe - research highlights 2010*, 44 (2011), ISBN: 978-88-86037-24-2
46. Rampino S<sup>f\*</sup>, Monari A, Evangelisti S, Rossi E, Ruud K, Laganà A, **A priori modeling of chemical reactions on a grid based virtual laboratory**, *Proceedings of the Cracow Grid Workshop CGW09*, 164-171 (2010), ISBN: 978-83-61433-01-9
47. Rampino S<sup>f\*</sup>, Laganà A, Ferraro G, Lawley K, **Time dependent quantum scattering using nonorthogonal coordinates - Parallel approach to the collinear A + BC → AB + C reaction**, *Science and Supercomputing in Europe - research highlights 2009*, 23 (2010), ISBN: 978-88-86037-23-5
48. Rampino S<sup>f\*</sup>, Skouteris D, Laganà A, **The O + O<sub>2</sub> reaction: quantum detailed probabilities and thermal rate coefficients**, *Theoretical Chemistry Accounts* 123, 249-256 (2009), DOI: 10.1007/s00214-009-0524-1
49. Rampino S<sup>f</sup>, Skouteris D, Laganà A, Garcia E, Saracibar A, **A comparison of the quantum state-specific efficiency of N + N<sub>2</sub> reaction computed on different potential energy surfaces**, *Physical Chemistry Chemical Physics* 11, 1752-1757 (2009), DOI: 10.1039/b818902a
50. Laganà A, Faginas Lago N, Rampino S, Huarte Larrañaga F, Garcia E, **Thermal rate coefficients in collinear versus bent transition state reactions: the N + N<sub>2</sub> case study**, *Physica Scripta* 78, 058116, 9 pp. (2008), DOI: 10.1088/0031-8949/78/05/058116
51. Rampino S<sup>f\*</sup>, Skouteris D, Laganà A, Garcia E, **A comparison of the isotope effect for the N + N<sub>2</sub> reaction calculated on two potential energy surfaces**, *Lecture Notes in Computer Science* 5072, 1081-1093 (2008), DOI: 10.1007/978-3-540-69839-5\_82

#### Lavori in attesa di pubblicazione

1. Potenti S, Paoloni L, Nandi S, Barone V, Rampino S\*, **Chemical bonding in cuprous complexes with simple nitriles: octet rule and resonance concepts versus quantitative charge-redistribution analysis**, submitted to *Physical Chemistry Chemical Physics* on 20 March 2020

## 7 Comunicazioni scientifiche

Autore di 54 comunicazioni a congressi, workshop, scuole o su invito, in sedi nazionali, europee e internazionali. 41 oral, di cui 19 invited, e 13 poster; di cui 1 elettronico. 49 volte autore presentatore, 47 volte primo autore, 31 volte singolo autore, 2 volte vincitore di premio (cfr. anche Sez. 11).

(\*presenter)

1. Rampino S\*, **Combined orbital-space/real-space analysis of the electron-charge rearrangement on parallel architectures**, *Invited seminar at the Edinburgh Parallel Computing Centre*, Edinburgh (United Kingdom), 14 agosto 2019 (invited oral)
2. Rampino S\*, **Combined Orbital-space/Real-space Analysis of Electron-charge Redistributions: Technique, Applications and Virtual Reality**, *Invited seminar at the School of Chemistry of the University of Edinburgh*, Edinburgh (United Kingdom), 9 agosto 2019 (invited oral)
3. Licari D, Rampino S\*, Barone V, **Machine learning of potential-energy surfaces within a bond-order sampling scheme**, *International Conference on Computational Science and its Applications ICCSA19*, Saint Petersburg (Russia), 1-4 luglio 2019 (oral)

4. Rampino S\*, **Combined orbital-space/real-space analysis of electron-charge rearrangement upon chemical bonding: from theory to virtual reality**, *Invited seminar at École nationale supérieure de chimie de Paris – Chimie ParisTech*, Paris (France), 15 maggio 2019 (invited oral)
5. Salvadori A, Fusè M, Mancini G, Rampino S\*, Barone V, **Diving into chemical bonding: an immersive analysis of the electron charge rearrangement through virtual reality**, *Winter Modeling 2019*, Napoli (Italy), 14 febbraio 2019 (invited oral)
6. Salvadori A, Fusè M, Mancini G, Rampino S\*, Barone V **Combined Orbital-space/Real-space Analysis of Chemical Bonding through Virtual Reality**, *Quinto Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana DCTC 2018*, Trieste (Italy), 19-21 settembre 2018 (poster)
7. Rampino S\*, **Combined Orbital-space/Real-space Immersive Analysis of Chemical Bonding through Virtual Reality**, *Second European Symposium on Chemical Bonding*, Oviedo (Spain), 3-7 settembre 2018 (poster)
8. Rampino S\*, **Aggiungi un posto a tavola: relatività e periodicità nei nuovi arrivati Copernicio, Flerovio e Oganesson**, *Invited lecture at Scuola Normale Superiore within the cycle “Chimica e storia: l’affermazione dell’atomismo” of the program “Accademia dei Lincei e Normale per la scuola”*, Pisa (Italy), 3 aprile 2019 (invited oral)
9. Rampino S\*, **Relativity and the Periodic Table: the Chemical Character of Copernicium, Flerovium and Oganesson**, *Invited seminar at Scuola Normale Superiore within the seminar cycle “Frontiere della Chimica”*, Pisa (Italy), 1 aprile 2019 (invited oral)
10. Rampino S\*, **Chimica Computazionale**, *Il pensiero computazionale – Percorso Formativo per i Docenti della Scuola Secondaria di Secondo Grado*, Università di Pisa, Pisa (Italy), 4 dicembre 2018 (invited oral)
11. Rampino S\*, **Analyzing the electron-charge rearrangement in chemical-bond formation through immersive virtual reality**, *Problems in discrete dynamics: from biochemical systems to rare events, networks, clustering and related topics III Edition*, Arcidosso (Italy), 21-23 giugno 2018 (invited oral)
12. Rampino S\*, **Probing charge-transfer effects in coordination chemistry through virtual reality**, *Invited seminar at Scuola Normale Superiore within the seminar cycle “Frontiere della Chimica”*, Pisa (Italy), 5 giugno 2018 (invited oral)
13. Rampino S\*, **Virtualizzazione e sistemi interattivi per la tutela e la diagnostica dei beni culturali**, *La nuova frontiera di arte e scienza - Quattro istituzioni a confronto*, Firenze (Italy), 3 maggio 2018 (invited oral)
14. Rampino S\*, **Immersive analysis of chemical bonding through virtual reality**, *Emerging Technologies in Scientific Data Visualisation*, Pisa (Italy), 4-6 april 2018 (invited oral)
15. Rampino S\*, **Computational modeling of gas-phase reactions in interstellar clouds**, *ASTRO-Winter Modeling “Advances in computational & experimental modelling: application to astrochemistry”*, Bologna (Italy), 15-16 febbraio 2018 (oral)
16. Rampino S\*, **Chemical bonding and spectroscopic observables in coordination complexes: insights and analysis through immersive virtual reality**, *Invited seminar at Scuola Normale Superiore within the seminar cycle “Frontiere della Chimica”*, Pisa (Italy), 20 ottobre 2017 (invited oral)
17. Rampino S\*, **Chemical bonding and spectroscopic observables in coordination complexes**, *Joint Technology Transfer Office JoTTO Fair 2017*, Pisa (Italy), 15 settembre 2017 (oral)

18. Rampino S\*, Fusè M, Salvadori A, Mancini G, Barone V, **Chemical bonding and spectroscopic observables in coordination complexes: analysis techniques and applications**, *XXVI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana*, Paestum (Italy), 10-14 settembre 2017 (oral)
19. Rampino S\*, **Quantum Dynamics**, *SOSC17 School on open Science Cloud*, Perugia (Italy), 5-9 giugno 2017 (invited lecture, cfr. anche Sez. 13)
20. Rampino S\*, Calderini D, Bloino J, Skouteris D, Barone V, **Thermodynamic and kinetic properties from fully-coupled anharmonic densities of states: a survey on different anharmonic perturbative treatments**, *DREAMS@Anacapri - Workshop ERC "Development of a Research Environment for Advanced Modeling of Soft Matter*, Anacapri (Italy), 20-22 aprile 2017 (oral)
21. Rampino S\*, **Dynamics of gas-phase elementary processes in the classical and quantum regime**, *Problems in discrete dynamics: from biochemical systems to rare events, networks, clustering and related topics*, Arcidosso (Italy), 17-18 febbraio 2017 (invited oral)
22. Rampino S\*, *Premio Eolo Scrocco 2016*, **Modeling gas-phase collision processes in interstellar clouds**, *IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana*, Pisa (Italy), 3-5 ottobre 2016 (invited oral)
23. Rampino S\*, **On the temperature dependence of the rate coefficient of formation  $C_2^+$  from C +  $CH^+$  on a new bond-order based potential energy surface**, *Reaction Rate Theory: Faraday Discussion*, Cambridge (United Kingdom), 19-21 settembre 2016 (poster)
24. Rampino S\*, **On the temperature dependence of the rate coefficient of formation  $C_2^+$  from C +  $CH^+$** , *1st Italian Workshop on Astrochemistry*, Firenze (Italy), 10-11 marzo 2016 (oral)
25. Rampino S\*, **Formation of  $C_2^+$  from C +  $CH^+$ : potential energy surface, dynamics and kinetics**, *First Annual Meeting of the WG1/WG4 COST Action 1401 Our AstroChemical History*, Pisa (Italy), 7-8 marzo 2016 (poster)
26. Rampino S\*, **Dynamics and kinetics of the astrochemical process  $C + CH^+ \rightarrow C_2^+ + H$** , *Invited seminar at Scuola Normale Superiore*, Pisa (Italy), 4 febbraio 2016 (invited oral)
27. Bistoni G, Rampino S, Pastore M, Tarantelli F, Belpassi L, **Charge-displacement analysis via Natural Orbitals for Chemical Valence: application to Dye-electrolyte Interactions in Organic Dye-Sensitized Solar Cells**, *International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics HOPV15*, Rome (Italy), 10-13 maggio 2015 (poster)
28. Belpassi L, Rampino S, Tarantelli F, Storchi L, Quiney H M, **Recent advances and perspectives in four-component Dirac-Kohn-Sham calculations**, *Fundamental aspects of DFT*, Oslo (Norway), 8-10 gennaio 2015 (poster)
29. Rampino S\*, **Relativistic effects and periodic trends: Dirac-Kohn-Sham characterization of super heavy elements Cn, Fl and Uuo**, *Winter Modeling 2014 Special Edition*, Pisa (Italy), 1-2 dicembre 2014 (oral)
30. Rampino S\*, Storchi L, Belpassi L, **Charge displacement analysis on four-component relativistic electron densities: a characterization study of Cn (E112), Fl (E114) and E118 interacting with gold clusters**, *11th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics REHE-2014*, Smolenice Castle (Slovak Republic), 20-24 settembre 2014 (poster)
31. Rampino S\*, Storchi L, Belpassi L, **Charge Displacement analysis on relativistic electron densities with the Dirac-Kohn-Sham parallel program BERTHA**, *2nd Annual Meeting of the AuCat FIRB 2010 project*, Udine (Italy), 22-23 luglio 2014 (oral)

32. Rampino S\*, **An open-ended implementation of a relativistic DFT program**, *International HPC Summer School 2014 on HPC Challenges in Computational Sciences*, Budapest (Hungary), 1-6 giugno 2014 (electronic poster)
33. Rampino S\*, Storch L, Belpassi L, Tarantelli F, Quiney H M, **Full data parallel approach to all-electron four-component Dirac-Kohn-Sham calculations**, *Winter Modeling 2014*, Modena (Italy), 13-14 marzo 2014 (oral)
34. Rampino S\*, **Electronically adiabatic quantum nuclear motion**, *7th Intensive Course of the European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling TCCM*, Perugia (Italy), 3-28 settembre 2012 (invited lecture, cfr. anche Sez. 13)
35. Rampino S\*, Laganà A, **Bond Order uniform grids for quantum reactive scattering**, *HPC-Europa2 Transnational Access Meeting TAM11*, Barcelona (Spain), 8-9 giugno 2011 (oral)
36. Rampino S\*, Ferraro G, Laganà A, Balint-Kurti G G, **Diatomic eigenvalue problem and wavepacket propagation for collinear H + H<sub>2</sub> using non orthogonal coordinates: the Bond Order formulation**, *XXXIX Congresso Nazionale di Chimica Fisica*, Stresa (Italia), 20-24 settembre 2010 (oral)
37. Rampino S\*, Balint-Kurti G G, Ferraro G, Laganà A, **Quantum reactive scattering using Bond Order coordinates: diatomic eigenvalue problem and wavepacket propagation for collinear H + H<sub>2</sub>**, *XVIII European Conference on Dynamics of Molecular Systems MOLEC 2010*, Curia-Anadia (Portugal), 5-10 settembre 2010 (poster)
38. Rampino S\*, Ferraro G, Balint-Kurti G G, Laganà A, **Bond Order coordinates for quantum reactive scattering: diatomic eigenvalue problem and wavepacket propagation for collinear H + H<sub>2</sub>**, *European Conference on Computational Chemistry EUCC8*, Lund (Sweden), 25-28 agosto 2010 (poster)
39. Rampino S\*, Ferraro G, Laganà A, **Wavepacket dynamics using Bond Length and Bond Order coordinates: parallel models for the collinear A + BC reaction**, *HPC-Europa2 Transnational Access Meeting TAM10*, Espoo (Finland), 15-17 giugno 2010 (oral)
40. Rampino S\*, **A priori modeling of chemical reactions on a grid-based virtual laboratory: towards standard representations of data for molecular chemistry**, *5th EGEE User Forum*, Uppsala (Sweden), 12-15 aprile 2010 (oral)
41. Rampino S\*, **Q5Cost and D5Cost: the dynamical testbed – why and how**, *COST D37 Working Group (QDYN, Elams, DeciQ) joint meeting*, Uppsala (Sweden), 12-14 aprile 2010 (oral)
42. Rampino S\*, **Quantum dynamics on grid and D5 formats**, *Hands on Training School on Molecular and Materials Science Grid Applications*, Trieste (Italy), 29 marzo-1 aprile 2010 (invited lecture, cfr. anche Sez. 13)
43. Rampino S, Garcia E, Pirani F, Laganà A, **Best Paper Award, Accurate quantum dynamics on Grid Platforms: some effects of long range interactions on the reactivity of N + N<sub>2</sub>**, *International Conference on Computational Science and its Applications ICCSA10*, Fukuoka (Japan), 23-26 marzo 2010 (oral)
44. Rampino S\*, Ferraro G, Laganà A, **Time dependent quantum scattering using nonorthogonal coordinates – Parallel approach to collinear A + BC**, *HPC-Europa2 Transnational Access Meeting TAM09*, Montpellier (France), 14-16 ottobre 2009 (oral)
45. Rampino S\*, Monari A, Evangelisti S, Rossi E, Ruud K, Laganà A, **A priori modeling of chemical reactions on a grid based virtual laboratory**, *Cracow Grid Workshop CGW09*, Cracow (Poland), 11-14 ottobre 2009 (oral)

46. Rampino S\*, **Parallel computing**, *4th Intensive Course of the European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling TCCM*, Groningen (The Netherlands) / Leuven (Belgium), 24 agosto-19 settembre 2009 (invited lecture, cfr. anche Sez. 13)
47. Laganà A, Costantini A, Faginas Lago N, Pacifici L, Rampino S, Gervasi O, Manuali C, Skouteris D, Tasso S, Alberti M, Huarte Larrañaga F, Garcia E, **A specialized support centre for molecular and material sciences and technologies of the European Grid Initiative**, *International Workshop on Quantum Reactive Scattering QRS10*, Dalian (China), 6-10 giugno 2009 (oral)
48. Rampino S\*, Skouteris D, Laganà A, **Evidences for microscopic branching: the O + O<sub>2</sub> exchange reaction**, *EPSRC CoCoChem Summer School – Coherent Control of Molecules*, London (United Kingdom), 20-23 aprile 2009 (poster)
49. Rampino S\*, **The time independent ABC code as a case study for quantum dynamics data models and standards**, *COST D37 Working Group Joint Meeting*, Prague (Czech Republic), 7-9 aprile 2009 (oral)
50. Rampino S\*, **Towards a standard representation of data for quantum dynamics**, *COST D37 Working Group (QDYN, DeciQ, CCWF) joint meeting*, Bologna (Italy), 18-20 dicembre 2008 (oral)
51. Rampino S\*, **Data models for GEMS: a grid enabled molecular simulator**, *CECAM Workshop on Standardization and databasing of ab initio and classical simulations*, Zurich (Switzerland), 18-19 settembre 2008 (oral)
52. Rampino S\*, Skouteris D, Laganà A, **Detailed O + O<sub>2</sub> reactive properties and thermal rate coefficients from exact quantum zero total angular momentum calculations**, *European Conference on Computational Chemistry EUCCO-CC7*, Venice (Italy), 11-15 settembre 2008 (poster)
53. Garcia E, Saracibar A, Rampino S, Skouteris D, Laganà A, **Quantum rate coefficients for the N + N<sub>2</sub> exchange reaction using an ab initio potential energy surface**, *Electronic Structure: Principles and Applications ESPA08*, Palma de Mallorca (Spagna), 2-5 settembre 2008 (poster)
54. Rampino S\*, Skouteris D, Laganà A, **A comparison of the isotope effect for the N + N<sub>2</sub> reaction calculated on two potential energy surfaces**, *International Conference on Computational Science and its Applications ICCSA08*, Perugia (Italy), 30 giugno-3 luglio 2008 (oral)

## 8 Progetti di ricerca

### 8.1 Coordinamento progetti di ricerca

- Principal investigator del progetto *Development of computational methods and tools for modeling chemical reactions*, finanziamento di 4000,00 €, Programma di supporto alla ricerca di base per il 2019 della Scuola Normale Superiore (Pisa, Italia), approvato il 26 marzo 2019 con inizio il 26 marzo 2019 e scadenza 31 dicembre 2019
- Principal investigator del progetto biennale *DIVE: Development of Immersive approaches for the analysis of chemical bonding through Virtual-reality Environments*, finanziamento di 45000,00 €, Programma Progetti di ricerca annuali e biennali della Scuola Normale Superiore (Pisa, Italia), approvato il 18 luglio 2018 dopo procedura di peer-review, con inizio il 20 luglio 2018 e scadenza il 19 luglio 2020
- Principal investigator del progetto *Development of computational protocols for modeling chemical reactivity: from structural aspects to reaction kinetics*, finanziamento di 4000,00 €, Programma di supporto alla ricerca di base per il 2018 della Scuola Normale Superiore (Pisa, Italia), approvato il 1 marzo 2018 con inizio il 1 marzo 2018 e scadenza 31 dicembre 2018

- Finanziamento di 25000,00 € approvato il 26 aprile 2018 da Scuola Normale Superiore per un assegno di ricerca annuale dal titolo *Sviluppo e applicazione di metodi computazionali per lo studio delle reazioni chimiche* sotto la responsabilità scientifica del Dr. Sergio Rampino presso la Scuola Normale Superiore, bandito il 5 giugno 2018, selezione conclusa il 5 luglio 2018, vincitore: Dr. Surajit Nandi
- Principal investigator del progetto *Development of a parallel program for the analysis of local charge flows in complex intermolecular interactions* finanziato dal programma europeo HPC-Europa3, project id: HPC17N2OQ8  
Approvato il: 1 April 2020
- Principal investigator del progetto *Combined orbital-space/real-space analysis of the electron-charge rearrangement on parallel architectures* finanziato dal programma europeo HPC-Europa3, project id: HPC17SA29X  
Approvato il: 3 April 2019, Da: 18 luglio 2019 - A: 17 agosto 2019
- Principal investigator del progetto *PARCROSS Parallel approaches for converged evaluation of integral reactive cross sections: Li + HF* presso il Consorzio Interuniversitario CINECA, project id: HP10CFHNXY  
Da: 21 marzo 2012 - A: 21 aprile 2013
- Principal investigator del progetto *Reduced dimensionality quantum mechanical thermal rate coefficients of hydroxyl radical reactions* finanziato dal framework europeo COST, project id: COST CM0901, STSM n. 7513  
Da: 21 gennaio 2011 - A: 14 febbraio 2011
- Principal investigator del progetto *MPI approach to the propagation of initial state selected wavepackets using non-orthogonal coordinates* finanziato dal programma europeo HPC-Europa2, project id: HPC Europa-2 Application n. 410 (HPC08QPA5C)  
Da: 19 maggio 2010 - A: 5 luglio 2010
- Principal investigator del progetto *Wavepacket dynamics in the bond-length and bond-order space in the grid-empowered molecular simulator*, finanziato dal framework europeo COST, project id: COST D37, STSM n. 5764  
Da: 15 febbraio 2010 - A: 28 marzo 2010
- Principal investigator del progetto *The issue of interoperability in GEMS: designing a D5Cost data model*, finanziato dal framework europeo COST, project id: COST D37, STSM n. 5218  
Da: 1 novembre 2009 - A: 12 dicembre 2009
- Principal investigator del progetto *Time dependent quantum scattering using non orthogonal coordinates* finanziato dal programma europeo HPC-Europa2, project id: HPC Europa-2 Application n. 12 (HPC08M9B19)  
Da: 1 febbraio 2009 - A: 23 luglio 2009
- Principal investigator del progetto *Scientific workflows for GEMS: the grid-empowered molecular simulator*, finanziato dal framework europeo COST, project id: COST D37, STSM n. 4438  
Da: 24 aprile 2009 - A: 24 maggio 2009

## 8.2 Partecipazione a progetti di ricerca

- Partecipazione al progetto *BMI FOCUS Brain Machine Interface in space manned missions: amplifying FOCUSED attention for error counterbalancing* (Coordinatore: Costruzioni NOVICROM S.R.L.) finanziato da POR FESR Toscana 2014-2020 (durata progetto: 08 gennaio 2018 - 07 gennaio 2020)  
Da: 08 gennaio 2018 - A: presente

- Partecipazione al progetto (come assegnista di ricerca sui fondi del progetto e poi come personale coinvolto nel progetto) *UE 7 PQ - ERC "Development of a Research Environment for Advanced Modeling of Soft Matter"*, acronimo DREAMS, Grant Agreement Number 320951 (Principal investigator: Vincenzo Barone) (durata progetto: 01 febbraio 2013 - 31 gennaio 2018)  
Da: 12 maggio 2016 - A: 31 gennaio 2018
- Partecipazione al progetto *Electronic structure and kinetics calculations on molecules of astrochemical interest* (Principal investigator: Serena Manti) finanziato da Scuola Normale Superiore (durata progetto: 2 novembre 2016 - 30 maggio 2017)  
Da: 2 novembre 2016 - A: 30 maggio 2017
- Partecipazione al progetto *COSMO: COmbined experimental and computational Spectroscopic MOdeling for astrochemical applications* (Principal investigator: Nicola Tasinato) finanziato da Scuola Normale Superiore (durata progetto: 2 novembre 2016 - 31 ottobre 2018, prorogato fino al 30 aprile 2019)  
Da: febbraio 2018 - A: presente
- Partecipazione al progetto (come assegnista di ricerca sui fondi del progetto) *FIRB-FUTURO in RICERCA 2010 "Nuovi catalizzatori molecolari di Au(I): da know-how a know-why"*, acronimo AuCat, project no. RBFR1022UQ (Principal investigator: Leonardo Belpassi)  
Da: 11 febbraio 2013 - A: 10 febbraio 2016
- Partecipazione al progetto BERTHA (tematica: sviluppo e applicazione di un codice di struttura elettronica relativistica basato sul formalismo Dirac-Kohn-Sham) presso il Consorzio Interuniversitario CINECA, project id: HP10CFHNNXY (durata progetto: 31 ottobre 2012 - 31 ottobre 2013)
- Partecipazione al progetto *EGI-InSPIRE European Grid Initiative: Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe* finanziato da Seventh Framework Programme of the European Union, Grant Agreement Number 261323, (durata progetto: 1 maggio 2010 - 31 dicembre 2014)
- Partecipazione al progetto *PHYS4ENTRY Planetary Entry Integrated Models* finanziato da Seventh Framework Programme of the European Union, Grant Agreement Number 242311 (Principal investigator: Mario Capitelli), (durata progetto: 1 maggio 2010 - 30 aprile 2014)
- Partecipazione al progetto *Dai processi elementari alla modellistica accurata di sistemi complessi* finanziato da Ministero dell'Istruzione dell'Università e della Ricerca, Programmi di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale PRIN 2008, Protocollo 2008KJX4SN\_003 (Principal investigator: Walther Caminati) (durata progetto: 24 mesi)  
Da: 22 marzo 2010 - A: 22 settembre 2012
- Partecipazione al progetto *EGEE-III - Enabling Grids for E-science III* finanziato da Seventh Framework Programme of the European Union, Grant Agreement Number 222667, (durata progetto: 1 maggio 2008 - 30 aprile 2010)
- Partecipazione al progetto *Fundamental Issues on the Aerothermodynamics of Planetary-Atmosphere (Re)Entry* finanziato da European Spatial Agency, Project id AO/1-5593/08/NL/HE, (durata progetto: 28 febbraio 2008 - 27 febbraio 2010)
- Partecipazione al progetto *CMST COST Action CM0901 Detailed chemical kinetic models for cleaner combustion* finanziato dal framework europeo COST (durata progetto: 28 gennaio 2010 - 27 gennaio 2014, cfr. anche Sezione 3)
- Partecipazione al progetto *CMST COST Action D37 Grid Computing in Chemistry: GRIDCHEM* finanziato dal framework europeo COST (durata progetto: 6 luglio 2006 - 5 luglio 2010, cfr. anche Sezione 3)



## 9 Partecipazione spin off

- Socio con partecipazione al capitale sociale e membro attivo dello spin off MASTER-UP S.R.L. “Molecular Applications to Science, Technology, E-learning, Research - University of Perugia” (<http://www.master-up.it/ita/index.php>). (<http://www.master-up.it/ita/index.php>). MASTER-UP nasce nel 2004 come spin off dell’Università degli studi di Perugia dalla convergenza di alcune linee di ricerca in calcoli di strutture elettroniche e dinamica molecolare con tecnologie informatiche di grid computing e realtà virtuale. MASTER-UP ha per oggetto l’attività di progettazione, produzione e commercializzazione di prodotti e servizi di innovazione tecnologica collegati a simulazioni e modellistiche molecolari. L’obiettivo di MASTER-UP è l’utilizzo dei prodotti della ricerca molecolare e informatica per l’insegnamento, l’addestramento, la pubblicità, lo sviluppo tecnologico ed il divertimento.

Da: 30 marzo 2015 - A: presente

## 10 Divulgazione scientifica

- Lezioni telematiche dal titolo **Teoria e calcolo: la chimica al confine con la fisica, la matematica e l’informatica** tenute nei giorni 27 (4h) aprile, 4 (4h), 8 (4h), 9 (4h), 15 (4h), 18 (2h), 22 (2h), 29 (2h) maggio, 5 (2h) e 8 (2h) giugno 2020 per un totale di 30 ore nell’ambito dell’iniziativa *La Normale va Scuola* a supporto delle scuole secondarie di tutta Italia durante l’emergenza sanitaria Covid-19
- Breve intervista su progetto HPC-Europa: <https://youtu.be/BD9fdInwSvk> (in inglese), 2019
- Video esplicativo del lavoro finalista top-10 per il premio Primo Levi 2016 della Società Chimica Italiana: <https://youtu.be/Q-uDGz8Seuk> (in italiano), 2017
- Lezione sulla Chimica computazionale, 2h, *Il pensiero computazionale – Percorso Formativo per i Docenti della Scuola Secondaria di Secondo Grado*, Università di Pisa, Italia: <https://mediateca.unipi.it/video/Lezione-8-Chimica-computazionale/5aa178a707ee1863cdad08676bcc56de> (in italiano), 4 dicembre 2018
- Lezione sulla tavola periodica, 1h, **Aggiungi un posto a tavola: relatività e periodicità nei nuovi arrivati Copernicio, Flerovio e Oganesson** in ciclo organizzato da Accademi dei Lincei e Scuola Normale superiore e rivolto a docenti di scuola secondaria di secondo grado, Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia: <https://youtu.be/ljflULJnBh8?t=4685> (in italiano), 3 aprile 2019

## 11 Riconoscimenti, premi e altri finanziamenti

- Attestato di Finalista top-10 **Premio Primo Levi 2016** rilasciato dalla Società Chimica Italiana in data 12 maggio 2017 con riconoscimento della pubblicazione:

Bistoni G, Rampino S\*, Scafuri N, Ciancaleoni G, Zuccaccia D, Belpassi L, Tarantelli F, **How  $\pi$  back-donation quantitatively controls the CO stretching response in classical and non-classical metal carbonyl complexes**, *Chemical Science* 7, 1174-1184 (2016), DOI: 10.1039/C5SC02971F

“tra i migliori 10 articoli su rivista internazionale pubblicati nell’anno 2016, nell’ambito delle Scienze Chimiche, da scienziati under-35 membri della Società Chimica Italiana”.

- **Premio Eolo Scrocco 2016** conferito in data 3 ottobre 2016 a Pisa dalla *Divisione di Chimica Teorica e Computazionale* della *Società Chimica Italiana* “per il suo originale contributo allo sviluppo e all'applicazione di metodi per il calcolo della dinamica delle reazioni chimiche” (dal diploma).

Il Premio “Eolo Scrocco” è indetto dalla Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) ed è conferito ogni anno a un giovane ricercatore al di sotto dei trentatré anni che abbia svolto, prevalentemente in Italia, attività di ricerca originale, di rilevante interesse e riconosciuta importanza nell'area dei metodi teorici e degli approcci computazionali applicati alle scienze chimiche. Il Premio vuole essere un riconoscimento e uno stimolo alla carriera di giovani che abbiano dimostrato particolari doti di innovazione e creatività, e consiste in una Targa, un Diploma, e l'invito a tenere una conferenza al prossimo Congresso della Divisione. (dal bando)

- **Best Paper Award 2010**, *10th International Conference on Computational Science and its Applications ICCSA10*, Fukuoka (Japan), 23-26 marzo 2010 per il lavoro:

Rampino S<sup>f\*</sup>, Garcia E, Pirani F, Laganà A, **Accurate quantum dynamics on Grid platforms: some effects of long range interactions on the reactivity of N + N<sub>2</sub>**, *Lecture Notes in Computer Science* 6019, 1-12 (2010), DOI: 10.1007/978-3-642-12189-0\_1

- **Grant** di pieno finanziamento per partecipazione, dietro selezione di merito, alla *International HPC Summer School 2014 on HPC Challenges in Computational Sciences*, Budapest (Hungary), 1-6 giugno 2014
- **Grant** di pieno finanziamento per partecipazione, dietro selezione di merito, alla *EPSRC CoCo-Chem Summer School – Coherent Control of Molecules*, London (United Kingdom), 20-23 aprile 2009
- **Cover Picture** (immagine di copertina) sulla rivista *Journal of Computational Chemistry* per il lavoro:

Salvadori A, Fusè M, Mancini G, Rampino S\*, Barone V, **Diving into chemical bonding: an immersive analysis of the electron charge rearrangement through virtual reality**, *Journal of Computational Chemistry* 39, 2607-2617 (2018), DOI: 10.1002/jcc.25523 (Cover picture: 10.1002/jcc.25044)

- **Cover Picture** (immagine di copertina, 23 maggio 2016) e **Cover Profile** (pagina dedicata con un profilo degli autori, 25 maggio 2016) sulla rivista *Chemistry - A European Journal* per il lavoro:

Trombach L, Rampino S, Wang L-S, Schwerdtfeger P, **Hollow gold cages and their topological relationship to dual fullerenes**, *Chemistry - A European Journal* 22, 8823-8834 (2016), DOI: 10.1002/chem.201601239

Cover Picture: 10.1002/chem.201602144, Cover Profile: 10.1002/chem.201602148

## 12 Sviluppo software presso enti di ricerca

*Cospicua e documentata attività di sviluppo di codice computazionale per il calcolo di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi chimici di varia complessità e interesse applicativo.*

- Sviluppatore di **Waverley** (<http://www.srampino.com/code.html#Waverley>) presso Consiglio Nazionale delle Ricerche (11 febbraio 2013 - 10 febbraio 2016) - un programma di struttura elettronica, a forte valenza didattica, basato su funzioni GTO e scritto in Fortran moderno in prospettiva object-oriented. Oltre a risolvere problemi di struttura elettronica di base (calcolo integrali mono- e bielettronici e procedura self-consistent field (SCF)), si interfaccia a Gaussian e permette di condurre analisi natural orbitals for chemical valence (NOCV).

*Paper di riferimento:* Fusè M, Rimoldi I, Cesarotti E, Rampino S\*, Barone V, **On the relation between carbonyl stretching frequencies and the donor power of chelating diphosphines in nickel dicarbonyl complexes**, *Chemical Science*, revisione inviata in data 7 febbraio 2017

- Sviluppatore di **Cubes** (<http://www.srampino.com/code.html#Cubes>) presso Consiglio Nazionale delle Ricerche (11 febbraio 2013 - 10 febbraio 2016) - un toolkit scritto in Fortran per la manipolazione di file 'cube' di Gaussian e analisi charge-displacement (CD), utile per la manipolazione (somma, sottrazione, integrazione, analisi) di orbitali e densità elettroniche.

*Paper di riferimento:* Rampino S<sup>f\*</sup>, **CUBES: a library and a program suite for manipulating orbitals and densities**, *VIRT&L-COMM* 7, 7-2015.6, 2 pp. (2015), ISSN: 2279-8773

- Sviluppatore di **Pestk** (<http://www.srampino.com/code.html#Pestk>) presso Consiglio Nazionale delle Ricerche (11 febbraio 2013 - 10 febbraio 2016) - un toolkit per la generazione di superfici di energia potenziale tramite il metodo space-reduced bond order (SRBO).

*Paper di riferimento:* Rampino S<sup>f\*</sup>, **Configuration-space sampling in potential energy surface fitting: a space-reduced bond-order grid approach**, *The Journal of Physical Chemistry A* 120, 4683-4692 (2016), DOI: 10.1021/acs.jpca.5b10018

- Sviluppatore di **BOrWp** presso Università degli Studi di Perugia/University of Bristol/École Normale Supérieure (15 febbraio 2010 - 5 luglio 2010) - un programma Fortran per la propagazione di pacchetti d'onda bidimensionali e calcolo di proprietà dinamiche di reazioni collineari a tre centri, basato sull'adozione di coordinate Bond Order.

*Paper di riferimento:* Rampino S<sup>f\*</sup>, Laganà A, **Bond Order uniform grids for quantum reactive scattering**, *International Journal of Quantum Chemistry* 112, 1818-1828 (2012), DOI: 10.1002/qua.23058

- Co-sviluppatore di **BERTHA** presso Consiglio Nazionale delle Ricerche (11 febbraio 2013 - 10 febbraio 2016) - un programma parallelo di DFT relativistico a quattro componenti scritto in Fortran90/95 e basato su un paradigma ad elevata efficienza di distribuzione del carico di lavoro e di memoria su processi concorrenti.

*Paper di riferimento:* Rampino S<sup>f\*</sup>, Belpassi L, Tarantelli F, Storch L, **Full parallel implementation of an all-electron four-component Dirac-Kohn-Sham program**, *Journal of Chemical Theory and Computation* 10, 3766-3776 (2014), DOI: 10.1021/ct500498m

Storch L, Rampino S, Belpassi L, Tarantelli F, Quiney H, **Efficient parallel all-electron four-component Dirac-Kohn-Sham program using a distributed matrix approach II**, *Journal of Chemical Theory and Computation* 9, 5356-5364 (2013), DOI: 10.1021/ct400752s

- Co-sviluppatore di **Q5/D5cost** presso University of Toulouse (1 novembre 2009 - 12 dicembre 2009) - un formato di dati (con relativa libreria di accesso e manipolazione scritta in Fortran) per l'interoperabilità tra codici computazionali di chimica e dinamica quantistica.

*Paper di riferimento:* Rossi E, Evangelisti S, Laganà A, Monari A, Rampino S, Verdicchio M, Baldrige K, Bendazzoli G L, Borini S, Cimiraaglia R, Angeli C, Kallay P, Lüthi H P, Ruud K, Sanchez-Marin J, Scemama A, Szalay P, Tajti A, **Code Interoperability and standard Data Formats in Quantum Chemistry and Quantum Dynamics: the Q5/D5cost Data Model**, *Journal of Computational Chemistry* 35, 611-621 (2014), DOI: 10.1002/jcc.23492

- Attualmente co-sviluppatore del pacchetto di programmi di struttura elettronica **Gaussian** presso Scuola Normale Superiore (Assignment and Confidentiality Agreement firmato in data 7 dicembre 2016) - sviluppo di procedure per calcoli di cinetica all'interno del modulo di analisi vibrazionale quantistica anarmonica.

*Paper di riferimento:* Rampino S<sup>f\*</sup>, Bloino J, Calderini D, Skouteris D, Barone V, **A survey on the evaluation of thermodynamical and kinetic properties of gas-phase systems via Wang-Landau sampling of vibrational states using different anharmonic perturbative treatments**, in preparazione (2018)

## 13 Attività didattiche e di supervisione

### 13.1 Didattica in corsi universitari italiani

- Titolare del corso **Chimica Inorganica Computazionale** in qualità di RTDA per l'anno accademico 2019/2020 all'interno dei Corsi di Dottorato in "Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari", "Astrochimica" e "Metodi computazionali e modelli matematici per le scienze e la finanza" della Scuola Normale Superiore di Pisa per una durata di 50 ore di didattica frontale da tenersi tra il 4 novembre 2019 e il 24 luglio 2020
- Titolare del corso **Laboratorio Virtuale di Chimica** in qualità di RTDA per l'anno accademico 2019/2020 all'interno del Corso Ordinario in Chimica e geologia (II anno) della Scuola Normale Superiore di Pisa per una durata di 30 ore di didattica frontale da tenersi tra il 4 novembre 2019 e il 31 gennaio 2020
- Titolare del corso **Chimica Inorganica Computazionale** in qualità di RTDA per l'anno accademico 2018/2019 all'interno dei Corsi di Dottorato in "Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari" e "Astrochimica" della Scuola Normale Superiore di Pisa per una durata di 50 ore di didattica frontale tra il 3 dicembre 2018 e il 28 giugno 2019
- Titolare del corso **Laboratorio Virtuale di Chimica** in qualità di RTDA per l'anno accademico 2018/2019 all'interno del Corso Ordinario in Chimica e geologia (II anno) della Scuola Normale Superiore di Pisa per una durata di 30 ore di didattica frontale tra il 1 ottobre 2018 e il 28 febbraio 2019
- Titolare del corso **Chimica Inorganica Computazionale** in qualità di RTDA per l'anno accademico 2017/2018 all'interno del Corso di Dottorato in Metodi e Modelli per le Scienze Molecolari della Scuola Normale Superiore di Pisa per una durata di 40 ore di didattica frontale tra l'8 gennaio 2018 e il 3 luglio 2018
- Titolare del corso **Laboratorio Virtuale di Chimica** in qualità di RTDA per l'anno accademico 2017/2018 all'interno del Corso Ordinario in Chimica e geologia (II anno) della Scuola Normale Superiore di Pisa per una durata di 40 ore di didattica frontale tra l'8 gennaio 2018 e l'8 giugno 2018
- Contratto (firmato in data 26 marzo 2008) per collaborazione coordinata e continuativa avente ad oggetto l'attività di supporto alla didattica per l'insegnamento di **Elementi di scienze atomiche e molecolari** del corso di laurea in Informatica dell'Università degli Studi di Perugia per un impegno di 20 ore da svolgersi tra il 7 aprile 2008 e il 7 luglio 2008.
- Contratto (firmato in data 2 maggio 2006) per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occasionale avente per oggetto l'attività di supporto alla didattica nel corso di **Informatica** per il corso di laurea in Chimica dell'Università degli Studi di Perugia per un impegno di 10 ore da svolgersi entro il 10 ottobre 2006.

### 13.2 Didattica presso Università estere

- Visiting lecturer presso ITMO University di Saint Petersburg (Russia), corso: *Research Methods and Scientific Writing*, 10 ore, da 16 ottobre a 18 ottobre 2019

### 13.3 Didattica in scuole di formazione europee e internazionali

- Modulo di 4 ore di lezione dal titolo **Quantum Dynamics** per la *SOSC17 School on open Science Cloud*, comitato organizzatore: Antonio Laganà, Daniele Spiga, Leonardo Pacifici, Livio Fanò, Noelia Faginas-Lago, Mirko Mariotti, Giuseppe Vitillaro, Perugia (Italia), 5-9 giugno 2017

- Modulo di 8 ore di lezione dal titolo **Electronically adiabatic quantum nuclear motion** per il *7th Intensive Course of the European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling TCCM*, direttore: Antonio Laganà, Perugia (Italia), 3-28 settembre 2012
- Modulo di 1 ora di lezione dal titolo **Quantum dynamics on grid and D5 formats** per il *Hands on Training School on Molecular and Materials Science Grid Applications*, direttore: Stefano Cozzini, Trieste (Italia), 29 marzo-1 aprile 2010
- Modulo di 4 ore di lezione dal titolo **Parallel computing** per il *4th Intensive Course of the European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling TCCM*, direttore: Ria Broer, Groningen (The Netherlands) / Leuven (Belgium), 24 agosto-19 settembre 2009

### 13.4 Didattica per docenti di scuole superiori

- Lezioni telematiche dal titolo **Teoria e calcolo: la chimica al confine con la fisica, la matematica e l'informatica** tenute nei giorni 27 (4h) aprile, 4 (4h), 8 (4h), 9 (4h), 15 (4h), 18 (2h), 22 (2h), 29 (2h) maggio, 5 (2h) e 8 (2h) giugno 2020 per un totale di 30 ore nell'ambito dell'iniziativa *La Normale va Scuola* a supporto delle scuole secondarie di tutta Italia durante l'emergenza sanitaria Covid-19
- Lezione di 1 ora dal titolo **Aggiungi un posto a tavola: relatività e periodicità nei nuovi arrivati Copernicio, Flerovio e Oganesson**, *Chimica e storia: l'affermazione dell'atomismo*, Accademia dei Lincei e Normale per la scuola, Pisa (Italy), 3 aprile 2019 (cfr. Sec. 7)
- Modulo di 2 ore di lezione dal titolo **Chimica Computazionale** per il ciclo di seminari *Il pensiero computazionale - Percorso Formativo per i Docenti della Scuola Secondaria di Secondo Grado*, responsabili scientifici: Paolo Ferragina and Fabrizio Luccio, Università di Pisa (Italy) 5 dicembre 2018 (cfr. Sec. 7)

### 13.5 Supervisione post-dottorale

- Dr. Surajit Nandi  
Assegno di ricerca: **Development and applications of computational methods for modeling chemical reactions**  
Periodo: 3 dicembre 2018 - 2 dicembre 2019  
Presso: Scuola Normale Superiore

### 13.6 Supervisione tesi di dottorato

- Bernardo Ballotta  
Progetto: **Computational development of models and tools for the kinetic study of astrochemical reactions**  
Periodo: 1 novembre 2018 - 31 ottobre 2022  
Presso: Scuola Normale Superiore

### 13.7 Supervisione tesi di laurea

- Matteo De Santis, **Bond-analysis techniques in the relativistic four-component framework: the chemical bond in coinage-metal cyanides**  
Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Università degli Studi di Perugia  
Anno Accademico: 2014/2015 - Data discussione: 25 febbraio 2016  
Relatori: Francesco Tarantelli, Sergio Rampino, Leonardo Belpassi

- Matteo Bazzurri, **From benchmark to real astrochemical reaction quantum calculations using a coordinated distributed computational frame**  
Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Università degli Studi di Perugia  
Anno Accademico: 2014/2015 - Data discussione: 25 febbraio 2016  
Relatori: Noelia Faginas Lago, Leonardo Pacifici, Sergio Rampino
- Liadys Mora Lagares, **The behavior of the position-spread tensor in noble-gas and alkali-metal difluorides**  
Laurea Magistrale in Scienze Chimiche e Erasmus Mundus Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM), Università degli Studi di Perugia  
Anno Accademico: 2013/2014 - Data discussione: 28 maggio 2015  
Relatori: Francesco Tarantelli, Sergio Rampino, Stefano Evangelisti

## 14 Incarichi accademici

### 14.1 Ruoli istituzionali

- Membro del Consiglio di Classe della Classe di Scienza della Scuola Normale Superiore, in qualità di rappresentante dei ricercatori, dal 13 settembre 2018

### 14.2 Collegio docenti di Dottorati

- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Astrochimica della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2020/2021 - Ciclo XXXVI, adesione su portale MIUR effettuata il 10 aprile 2020
- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Metodi e modelli per le scienze molecolari della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2020/2021 - Ciclo XXXVI, adesione su portale MIUR effettuata il 10 aprile 2020
- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Data Science della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2020/2021 - Ciclo XXXVI, adesione su portale MIUR effettuata il 10 aprile 2020
- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Astrochimica della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2019/2020 - Ciclo XXXV, adesione su portale MIUR effettuata il 21 marzo 2019
- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Metodi e modelli per le scienze molecolari della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2019/2020 - Ciclo XXXV, adesione su portale MIUR effettuata il 21 marzo 2019
- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Data Science della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2019/2020 - Ciclo XXXV, adesione su portale MIUR effettuata il 21 marzo 2019
- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Astrochimica della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2018/2019 - Ciclo XXXIV, adesione su portale MIUR effettuata il 28 marzo 2018
- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Metodi e modelli per le scienze molecolari della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2018/2019 - Ciclo XXXIV, adesione su portale MIUR effettuata il 6 marzo 2018

- Membro del Collegio docenti del Dottorato in Data Science della Scuola Normale Superiore di Pisa per l'Anno Accademico 2018/2019 - Ciclo XXXIV, adesione su portale MIUR effettuata il 6 marzo 2018

### 14.3 Commissioni di dottorato

- Membro della commissione del dottorato di Muhammad Jan Akhunzada, **Understanding molecular phenomena and mechanisms occurring in the lipid membranes through molecular dynamics simulations**, Corso di Perfezionamento in Metodi e modelli per le scienze molecolari, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 26 settembre 2018, Relatore: Giuseppe Brancato
- Membro della commissione per la selezione dei candidati al dottorato in Data Science, A. A. 2019/2020, Scuola Normale Superiore (Pisa)/Università di Pisa (Pisa)/IMT School for advanced studies Lucca (Lucca)/Scuola Superiore Sant'Anna (Pisa)/Consiglio Nazionale delle Ricerche (Pisa), 14 March and 8-9 April 2019, 13, 27 and 30 September 2019
- Membro della commissione del dottorato di Andrea Piserchia, **New integrated numerical approaches to the Smoluchowski equation for the interpretation of molecular properties in solution phase chemistry**, Corso di Perfezionamento in Metodi e modelli per le scienze molecolari, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 8 marzo 2018, Relatore: Vincezo Barone
- Membro della commissione del dottorato di Niccolò Albertini, **New approaches to scientific visualization in virtual immersive environments for science and humanities**, Corso di Perfezionamento in Metodi e modelli per le scienze molecolari, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 10 gennaio 2018, Relatore: Vincezo Barone
- Membro della commissione del dottorato di Andrea Salvadori, **Design and development of a cross-platform molecular viewer for Immersive Virtual Reality systems**, Corso di Perfezionamento in Chimica, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 11 aprile 2017, Relatori: Vincezo Barone, Giordano Mancini
- Nomina a supplente nella commissione del dottorato di Carles Martí Aliod Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche - XXXI ciclo, Università degli Studi di Perugia (Perugia), Data discussione: 14 dicembre 2018
- Nomina a supplente nella commissione del dottorato di Gianluca del Frate, **Development, validation and application of accurate molecular force fields for complex soft matter system**, Corso di Perfezionamento in Metodi e modelli per le scienze molecolari, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 25 gennaio 2018, Relatori: Vincezo Barone, Giordano Mancini
- Nomina a supplente nella commissione del dottorato di Alberto Baiardi, **Development of computational methods for the simulation of vibrational and electronic spectra of medium-to-large sized molecular systems**, Corso di Perfezionamento in Metodi e modelli per le scienze molecolari, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 12 gennaio 2018, Relatori: Vincezo Barone, Julien Bloino
- Nomina a supplente nella commissione del dottorato di Jacopo Baldini, **New visualization tools for sciences and humanities: databases and virtual reality**, Corso di Perfezionamento in Metodi e modelli per le scienze molecolari, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 10 gennaio 2018, Relatore: Vincezo Barone

- Nomina a supplente nella commissione del dottorato di Muzaffer Ahmad, **New Fluorescent Tools for The Development of Advanced Vopochromic Films Based on Thermoplastic Polymers**, Corso di Perfezionamento in Chimica, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 5 ottobre 2017, Relatore: Andrea Pucci
- Nomina a supplente nella commissione del dottorato di Ilaria Domenichelli, **Functional Polymers by Nitroxide Radical Coupling (NRC) Reaction**, Corso di Perfezionamento in Chimica, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 11 aprile 2017, Relatore: Elisa Passaglia
- Nomina a supplente nella commissione del dottorato di Danilo Calderini, **Kinetics and dynamics for chemical reactions in gas phase**, Corso di Perfezionamento in Chimica, Scuola Normale Superiore (Pisa), Data discussione: 28 ottobre 2016, Relatori: Vincezo Barone, Dimitrios Skouteris

#### 14.4 Commissioni per assegni di ricerca

- Membro della commissione per il conferimento dell'assegno di ricerca *Progettazione e sviluppo di un sistema di grafica molecolare per sistemi di realtà virtuale immersiva*, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 16 gennaio 2020.
- Membro della commissione per il conferimento dell'assegno di ricerca *Studi computazionali di molecole prebiotiche di origine endogena o esogena*, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 10 e 23 settembre 2019.
- Membro della commissione per il conferimento dell'assegno di ricerca *Sviluppo e applicazione di metodi multiscala per la simulazione delle proprietà spettroscopiche di sistemi molecolari complessi*, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 18 gennaio 2019.
- Membro della commissione per il conferimento dell'assegno di ricerca *Sviluppo di modelli teorico/computazionali per il calcolo di proprietà ottiche di sistemi molecolari interagenti con nanosubstrati bidimensionali*, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 19 dicembre 2018.
- Membro della commissione per il conferimento dell'assegno di ricerca *Sviluppo e applicazione di protocolli computazionali per la simulazione dell'interazione di inquinanti ambientali su substrati semiconduttori*, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 12 e 14 novembre 2018.
- Membro della commissione per il conferimento dell'assegno di ricerca *Sviluppo e applicazione di metodi computazionali per lo studio delle reazioni chimiche*, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 5 luglio 2018.
- Membro della commissione per il conferimento dell'assegno di ricerca *Ricostruzioni digitali interattive di contesti storico-artistici per installazioni museali a scopo didattico, culturale e divulgativo*, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 21 maggio 2018.

#### 14.5 Altre commissioni

- Membro della commissione per il Colloquio di passaggio d'anno del corso di perfezionamento Modelli e metodologie per le scienze molecolari della Scuola Normale Superiore per l'Anno Accademico 2018/2019, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 30 ottobre 2018.
- Membro della commissione per gli esami di ammissione al Corso Ordinario della Scuola Normale Superiore per l'Anno Accademico 2018/2019, Scuola Normale Superiore (Pisa). Data: 22 agosto 2018 - 10 settembre 2018.



## 15 Scuole di formazione europee e internazionali

*Partecipazione a scuole di formazione nazionali, europee e internazionali su tematiche attinenti ai seguenti campi: chimica fisica, chimica teorica e computazionale, sviluppo codice ad elevate prestazioni, calcolo scientifico su piattaforme computazionali avanzate.*

- **School on Quantum Chemical Topology (Oviedo, Spain)**  
Organizzatori: Julia Contreras García, Eduard Matito, Ángel Martín Pendás  
Da: 2 settembre 2018 - A: 3 settembre 2018
- **European Summerschool in Quantum chemistry ESQC 2015 (Palermo, Italy)**  
Direttore: Trond Saue  
Da: 6 settembre 2015 - A: 19 settembre 2015
- **International HPC Summer School 2014 on HPC Challenges in Computational Sciences (Budapest, Hungary)**  
Organizzatori: PRACE (EU), XSEDE (US), RIKEN AICS (Japan), Compute/Calcul (Canada)  
Da: 1 giugno 2014 - A: 6 giugno 2014
- **Italian Grid Training Workshop (Rome, Italy)**  
Organizzatori: Antonio Laganà, Consortium GARR  
Da: 20 gennaio 2014 - A: 21 gennaio 2014
- **22nd Summer School on Parallel Computing (Bologna, Italy)**  
Organizzatori: CINECA  
Da: 2 settembre 2013 - A: 13 settembre 2013
- **EPSRC CoCoChem Summer School - Coherent Control of Molecules (London, United Kingdom)**  
Organizzatori: Helen Fielding, Graham Worth, Abigail Nunn  
Da: 20 aprile 2009 - A: 23 aprile 2009
- **Hands-on Tutorial on Grid Computing (Trieste, Italy)**  
Direttori: Stefano Cozzini, Antonio Laganà  
Da: 15 settembre 2008 - A: 18 settembre 2008
- **1st Intensive course of the European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling TCCM (Perugia, Italy)**  
Direttore: Antonio Laganà  
Da: 17 luglio 2006 - A: 12 agosto 2006

## 16 Organizzazione congressi

- Membro del comitato scientifico del congresso *Young researchers meet molecular spectroscopy*, Pisa (Italia), 4 aprile-5 aprile 2019
- Membro del comitato organizzatore del congresso *II Italian Workshop on Astrochemistry*, Follonica (Italia), 13 giugno-16 giugno 2018
- Membro del comitato organizzatore del congresso *ERC AdG | Barone | DREAMS Advances in computational modelling: from isolated molecules to soft matter*, Pisa (Italia), 29 novembre-2 dicembre 2017

- Membro del comitato organizzatore del congresso *Problems in discrete dynamics: from biochemical systems to rare events, networks, clustering and related topics*, Arcidosso (Italia), 17-18 febbraio 2017

## 17 Affiliazione a società scientifiche

- Membro della Società Chimica Italiana dal 2015
- Membro della Royal Society of Chemistry da 27 settembre 2016 a 31 dicembre 2017

## 18 Attività editoriali

- Co-fondatore (dal 2011) e editore (dal 2013) della rivista scientifica elettronica internazionale VIRT&L-COMM, ISSN: 2279-8773, edita da Master-Up S.R.L. e dedicata alle tematiche di Molecular and Materials Science, Teaching and Learning, and Computer Science Research
- Referee per il *Journal of Molecular Modeling* (Springer), *Molecules* (MDPI), *International Journal of Quantum Chemistry* (Wiley), *physica status solidi (a)* (Wiley), and *Inorganic Chemistry* (ACS).

## 19 Competenze linguistiche e informatiche

- Madrelingua: italiano
- Piena padronanza scritta e orale: inglese, francese
- Livello base: tedesco, spagnolo, polacco
- Padronanza scolastica: latino, greco antico
- Comprovata padronanza di linguaggi di programmazione scientifica (Fortran, programmazione orientata agli oggetti, calcolo ad elevate prestazioni), editing di testo (VIM, LaTeX, pacchetti Office e simili), software di grafica (GIMP, Gnuplot, Matplotlib, PyMol), creazione e gestione di siti web ([www.srampino.com](http://www.srampino.com)).

Pisa 20 maggio 2020