



AL MAGNIFICO RETTORE
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO

COD. ID: 4667

Il sottoscritto chiede di essere ammesso a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica

Responsabile scientifico: Prof. Michele Ceotto

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

Cognome	Gabas
Nome	Fabio
Data Di Nascita	07/09/1988

OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura
Post Doc	Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Titolo	Corso di studi	Università	anno conseguimento titolo
Dottorato Di Ricerca	Chimica	Università degli Studi di Milano	2019

LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Inglese	C1

PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio
2013-2015	Borsa di studio progetto L.I.S.A. presso il centro di calcolo CINECA, Segrate, finanziato dalla regione Lombardia. Attività legate al supporto HPC in diversi campi di applicazione scientifica.

ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

Implementazione di teorie semiclassiche in codici Fortran o Python interfacciabili con software open source per calcoli quantistici e per dinamica molecolare classica, come NWChem, Gromacs e Tinker. Nello specifico i codici si basano sulla teoria semiclassica Multiple Coherent SemiClassical Initial Value Representation (MCSCIVR) e sul recente sviluppo del Divide and Conquer SemiClassical Initial Value Representation (DCSCIVR) che permette l'applicazione del metodo a sistemi di grandi dimensioni. In particolare lo scopo è quello di studiare lo spettro vibrazionale di sistemi molecolari complessi, come per esempio sistemi supramolecolari o sistemi solvatati, in cui gli effetti quantistici possono svolgere un ruolo determinante.



CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

Data	Titolo	Sede
6-10/06/2016	Different Routes for Quantum Dynamics	Losanna, Svizzera
28-31/08/2018	High Dimensional Quantum Dynamics (HDQD), Challenges and Applications	Lille, Francia

PUBBLICAZIONI

Articoli su riviste
A. Forni, S. Pieraccini, S. Rendine, F. Gabas, and M. Sironi, "Halogen bonding interaction with pi systems: CCSD(T), MP2 and DFT calculations", <i>ChemPhysChem</i> , 13.18 (2012): 4224-4234
C. Aieta, F. Gabas, and M. Ceotto, "An Efficient Computational Approach for the Calculation of the Vibrational Density of States." <i>The Journal of Physical Chemistry A</i> 120.27 (2016): 4853-4862
F. Gabas, R. Conte, and M. Ceotto, "On-the-fly ab initio semiclassical calculation of glycine vibrational spectrum." <i>Journal of chemical theory and computation</i> 13.6 (2017): 2378-2388
F. Gabas, Giovanni Di Liberto, Riccardo Conte, and Michele Ceotto. "Protonated Glycine Supramolecular Systems: the need for quantum dynamics" <i>Chemical Science</i> , 9 7894 (2018)
Chiara Aieta, F. Gabas, and Michele Ceotto. "A Parallel Implementation of Semiclassical Transition State Theory", <i>Journal of Chemical Theory and Computation</i> , 15.4 (2019): 2142-2153
Micciarelli, M., Gabas, F., Conte, R., & Ceotto, M. (2019). An effective semiclassical approach to IR spectroscopy. <i>The Journal of chemical physics</i> , 150(18), 184113
Gabas, F., Di Liberto, G., & Ceotto, M. (2019). Vibrational investigation of nucleobases by means of divide and conquer semiclassical dynamics. <i>The Journal of chemical physics</i> , 150(22), 224107
Conte, R., Gabas, F., Botti, G., Zhuang, Y., & Ceotto, M. (2019). Semiclassical vibrational spectroscopy with Hessian databases. <i>The Journal of chemical physics</i> , 150(24), 244118
Cazzaniga, M., Micciarelli, M., Moriggi, F., Mahmoud, A., Gabas, F., & Ceotto, M. (2020). Anharmonic calculations of vibrational spectra for molecular adsorbates: A divide-and-conquer semiclassical molecular dynamics approach. <i>The Journal of Chemical Physics</i> , 152(10), 104104
Gabas, F., Conte, R., & Ceotto, M. (2020). Semiclassical Vibrational Spectroscopy of Biological Molecules using Force Fields. <i>Journal of Chemical Theory and Computation</i> , 16(6), 3476-3475

ALTRE INFORMAZIONI

Anno	Descrizione attività
2015	Attività lavorativa nello User Support Team di "SCS, Technology Transfer of Supercomputing Solutions for Enterprises", Segrate (MI), Italia



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del DPR n. 445/2000.

Il presente curriculum, non contiene dati sensibili e dati giudiziari di cui all'art. 4, comma 1, lettere d) ed e) del D.Lgs. 30.6.2003 n. 196.

Luogo e data: ___Milano___, ___24/07/2020___

FIRMA *Fabio Casas*