

**FORMATO EUROPEO
PER IL CURRICULUM
VITAE**



INFORMAZIONI PERSONALI

Nome **MANCINI, LUCA**
Indirizzo **LOC. RANZOLA 184, 06010, MONTE SANTA MARIA TIBERINA (PG)**
E-mail **luca.mancini@unipg.it**
Nazionalità Italiana

POSIZIONE ATTUALE

Dal 18/12/2023

RTDA - Ricercatore a tempo determinato (L. 240/2010) presso il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie; Università di Perugia.
Settore concorsuale 03/B1 – Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici - SSD CHIM/03 – Chimica Generale ed Inorganica
REFERENTI SCIENTIFICI: Prof. Filippo DE ANGELIS, Prof.ssa Maria Noelia FAGINAS LAGO
TITOLO: Modellazione di nanomateriali per applicazioni energetiche e di carbon neutrality

ESPERIENZA LAVORATIVA

01/06/2023 - 30/11/2023

Titolare di una borsa di ricerca presso il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie; Università di Perugia.
AREA: 03 - SSD CHIM/03
RESPONSABILE SCIENTIFICO: Prof.ssa Nadia Balucani
TITOLO: Formazione di molecole complesse nello spazio interstellare.
ATTIVITÀ: Studio teorico, mediante metodi *ab initio* e calcoli statistici, del meccanismo di reazione a livello microscopico di reazioni di formazione e distruzione di molecole complesse nel mezzo interstellare e nelle atmosfere planetarie.

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

• Date (da – a)	2019-2023
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Corso di Dottorato di Ricerca in scienze Chimiche (XXXV ciclo) presso l'Università degli Studi di Perugia; Curriculum: Chimica Teorica e Modellistica Computazionale (SSD: CHIM/O3)
• Qualifica conseguita	Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche (<i>con lode</i>). Titolo della Tesi: "Computational astrochemistry: a journey from the nitrogen chemistry of Titan to the silicon and phosphorus chemistry of interstellar clouds". Dissertazione in data 03 aprile 2023 Supervisor: Prof.ssa Nadia Balucani, Dr. Dimitrios Skouteris.
• Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)	EQF Level 8
• Date (da – a)	2017-2019
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche. Università degli Studi di Perugia; Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie - <u>Erasmus Mundus Joint Master Degree (EMJMD) in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)</u> ; Universidad Autónoma de Madrid.
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Chimica Teorica e Modellistica Computazionale, Chimica Inorganica, Chimica dei Materiali Inorganici, Meccanismi e Dinamica delle Reazioni Chimiche
• Qualifica conseguita	Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54). Valutazione: 110/110 <i>con lode</i> . Tesi sperimentale (svolta in collaborazione con Université Grenoble Alpes; Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble) dal titolo "A theoretical investigation of the reactions between H ⁺ and Interstellar Complex Organic Molecules", Supervisor: Prof.ssa Nadia Balucani, Prof.ssa Cecilia Ceccarelli. Media ponderata degli esami di profitto: 29.6
• Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)	EQF Level 7
• Date (da – a)	2014-2017
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Corso di Laurea in Chimica. Università degli studi di Perugia; Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie.
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Chimica Teorica, Chimica Inorganica, Chimica Organica, Chimica Fisica, Chimica Analitica
• Qualifica conseguita	Laurea in Chimica (L060). Valutazione: 110/110 <i>con lode</i> . Tesi sperimentale (svolta in collaborazione con CNR-SCITEC Perugia) dal titolo "Studio Teorico dei meccanismi di formazione di SiS nello spazio interstellare", Supervisor: Prof.ssa Nadia Balucani, Prof. Marzio Rosi. Media ponderata degli esami di profitto: 28.9
• Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)	EQF Level 6
ALTRO	
• Date (da – a)	23-27 ottobre 2023
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Partecipazione alla scuola internazionale "Fifth International School on Open Science Cloud" svoltosi a Perugia (Dipartimento di Fisica), IT

<ul style="list-style-type: none"> • Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio 	<p>Managing software and data; tools for Data Handling and Processing; introduction to Machine and Deep Learning; Data Science; Workflow Management; Cloud Solutions for Advanced Big Data Workflows</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) 	<p>12-16 luglio 2021</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione 	<p>Partecipazione alla scuola internazionale “<i>Second ITN-ACO network school</i>”, svoltasi a Padova, come parte del progetto Innovative Training Networks (ITN) Astro-Chemical Origins (ACO). (4 ECTS)</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio 	<p>Osservazione e modellizzazione astronomica, astrochimica teorica e sperimentale, virtual reality, cloud computing, science writing.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) 	<p>25-31 ottobre 2020</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione 	<p>Partecipazione alla scuola “<i>Multiscale, Machine learning and QSAR Methods applied to biomolecules</i>”, svoltosi a Perugia (Dipartimento di Matematica e Informatica), IT.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio 	<p>Cloud Computing, Big Data Management, Multiscale Modeling of Biochemical Processes, High-Performance Molecular Dynamics, QSAR Methods applied to Biomolecules.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) 	<p>2-20 dicembre 2019</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione 	<p>Partecipazione alla scuola “<i>ITN-ACO network school</i>”, svoltasi a Perugia (Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie) come parte del progetto Innovative Training Networks (ITN) Astro-Chemical Origins (ACO). (12 ECTS)</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio 	<p>Osservazione e modellizzazione astronomica, formazione di sistemi solari, comete e meteoriti, astrochimica teorica e sperimentale, virtual reality, artificial intelligence, high performance computing.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) 	<p>3-28 settembre 2018</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione 	<p>Partecipazione a “<i>XIII International Course of the European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (EM-TCCM)</i>”, svoltosi a Perugia (Dipartimento di Matematica e Informatica) come parte dell’ Erasmus Mundus Joint Master Degree (EMJMD) in Theoretical Chemistry and Computational Modelling.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio 	<p>Advanced Electronic Structure and Condensed Matter, Advanced Computational Techniques, Molecular Dynamics Simulations, Applied computational Chemistry</p>
<p>SOGGIORNI DI RICERCA ALL’ESTERO</p>	
<ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) 	<p>gennaio-maggio 2019</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione 	<p>Mobilità nell’ambito del progetto Erasmus+Traineeship. Université Grenoble Alpes; Institut de Planétologie et d’Astrophysique de Grenoble (IPAG), Grenoble, FR. Supervisor: Prof.ssa Cecilia Ceccarelli</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio 	<p>Attività di formazione in ambito astrochimico sulla chimica dei processi di nascita ed evoluzione di stelle e sistemi stellari e modellizzazione astrochimica. Attività di ricerca incentrata su calcoli <i>ab initio</i> (DFT e Coupled-Cluster) per lo studio del meccanismo di reazione a livello microscopico di processi in fase gassosa di particolare interesse in ambito astrochimico</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Titolo del progetto 	<p>A theoretical investigation of the reactions between H⁺ and Interstellar Complex Organic Molecules</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità 	<p>Ricerca scientifica</p>

• Date (da – a)	giugno-luglio 2022
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Visiting PhD student. Mobilità nell'ambito del progetto Erasmus+Traineeship. Sorbonne Université; Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie (IMPIC), Parigi, FR. Supervisor: Prof. A. Marco Saitta
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Studio teorico di reazioni in fase liquida di particolare rilevanza in ambito astrochimico e di atmosfere planetarie tramite tecniche di <i>ab initio</i> molecular dynamics (AIMD)
• Titolo del progetto	Theoretical investigations of chemical reactions relevant for Titan's atmosphere
• Principali mansioni e responsabilità	Ricerca scientifica
• Date (da – a)	novembre 2022
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Visiting PhD student. Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea-Facultad de Farmacia, Vitoria-Gasteiz, SP. Supervisor: Prof. Ernesto Garcia Para
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Studio teorico, tramite l'uso di metodi di traiettorie quasi classiche (QCT), del meccanismo di reazione a livello microscopico di reazioni bimolecolari in fase gassosa con possibili applicazioni in combustione, astrochimica e chimica delle atmosfere planetarie.
• Titolo del progetto	Theoretical investigations of chemical reactions relevant for star forming regions and planetary atmospheres.
• Principali mansioni e responsabilità	Ricerca scientifica

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO

- Attività di tutorato ufficiale per l'insegnamento "Chimica" (SSD: CHIM/07) della Laurea in Ingegneria Meccanica del Dipartimento di Ingegneria per ore **100**, A.A. 2021/2022 - Università degli Studi di Perugia.
- Attività di tutorato ufficiale per l'insegnamento "Chimica Generale ed Inorganica 1" (SSD: CHIM/03) della Laurea in Chimica del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie per ore **10**, A.A. 2020/2021 - Università degli studi di Perugia.
- Attività di tutorato ufficiale per l'insegnamento "Chimica Generale ed Inorganica 1" (SSD: CHIM/03) della Laurea in Chimica del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie per ore **12**, A.A. 2019/2020 - Università degli studi di Perugia.
- Co-relatore di una tesi di Laurea Triennale. Laureando: Leonardo Moriconi (Università di Perugia). Tesi finale del Corso di Laurea in Chimica dal titolo: "Studio teorico dei possibili cammini di formazione di PO e PN nello spazio interstellare" A.A. 2019/2020
- Co-relatore di una tesi di Laurea Triennale. Laureando: Marco Trinari (Università di Perugia). Tesi finale del Corso di Laurea in Chimica dal titolo: "Studio teorico della reazione fra lo ione S⁺ e il radicale sililene e rilevanza per la formazione di SiS interstellare" A. A. 2020/2021.
- Membro della commissione di profitto per l'esame di "Chimica Generale ed Inorganica 1" della Laurea in Chimica del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie (SSD: CHIM/03).
- Membro della commissione di profitto per l'esame di "Atmospheric Chemistry" della Laurea in Chimica del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie (SSD: CHIM/03).
- Membro della commissione di profitto per l'esame di "Atomic and Molecular Processes" della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie (SSD: CHIM/03).
- Membro della commissione di profitto per l'esame di "Chimica Generale e Inorganica" della Laurea in Scienze della Formazione Primaria (SSD: CHIM/03).
- Membro della commissione di Laurea in Chimica A. A. 2020/2021
- Cultore della materia per l'insegnamento di "Chimica Generale e Inorganica 1" del corso di Laurea in Chimica (SSD: CHIM/03)

**ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O
RICERCA PRESSO ISTITUTI
ITALIANI O STRANIERI**

- Cultore della materia per l'insegnamento di "Atmospheric Chemistry" del corso di Laurea in Chimica (SSD: CHIM/03)
- Cultore della materia per l'insegnamento di "Atomic and Molecular Processes" del corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (SSD: CHIM/03)
- Cultore della materia per l'insegnamento di "Chimica Generale" del corso di Laurea in Scienze della Formazione Primaria (SSD: CHIM/03)
- Cultore della materia per l'insegnamento di "Chimica" del corso di Laurea in Ingegneria Meccanica (SSD: CHIM/07)
- Cultore della materia per l'insegnamento di "Chimica e Metallurgia - modulo Chimica" del corso di Laurea in Ingegneria Meccanica (SSD: CHIM/07)
- Mobilità nell'ambito del progetto *Erasmus+Traineeship*. Periodo: gennaio-maggio 2019. Université Grenoble Alpes; Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG), Grenoble, FR. Supervisor: Prof.ssa Cecilia Ceccarelli. Titolo del progetto: *A theoretical investigation of the reactions between H⁺ and Interstellar Complex Organic Molecules*. Principali mansioni: attività di ricerca e formazione in ambito astrochimico. Calcoli *ab initio* (DFT e Coupled-Cluster) per lo studio del meccanismo di reazione a livello microscopico di processi in fase gassosa di particolare interesse in ambito astrochimico.
- Visiting PhD student. Mobilità nell'ambito del progetto *Erasmus+Traineeship*. Periodo: giugno-luglio 2022. Sorbonne Université; Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie (IMPMC), Parigi, FR. Supervisor: Prof. A. Marco Saitta. Titolo del progetto: *Theoretical investigations of chemical reactions relevant for Titan's atmosphere*. Principali mansioni: attività di ricerca. Studio teorico di reazioni in fase liquida tramite tecniche di *ab initio* molecular dynamics (AIMD) di particolare rilevanza in ambito astrochimico e di atmosfere planetarie.
- Visiting PhD student. Periodo: novembre 2022. Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea-Facultad de Farmacia, Vitoria-Gasteiz, SP. Supervisor: Prof. Ernesto Garcia Para. Titolo del progetto: *Theoretical investigations of chemical reactions relevant for star forming regions and planetary atmospheres*. Principali mansioni: ricerca scientifica. Studio teorico, tramite l'uso di metodi di traiettorie quasi classiche (QCT), del meccanismo di reazione a livello microscopico di reazioni bimolecolari in fase gassosa con possibili applicazioni in combustione, astrochimica e chimica delle atmosfere planetarie.
- Collaborazione con la Prof.ssa Daniela Ascenzi del Dipartimento di Fisica, Università di Trento. Principale attività: studio teorico-computazionale e sviluppo di metodologie teoriche volte all'analisi del meccanismo di reazione a livello microscopico di reazioni bimolecolari ione-neutro, di particolare interesse per l'astrochimica.

**PARTECIPAZIONE A GRUPPI DI
RICERCA NAZIONALI E
INTERNAZIONALI**

- Studente affiliato del progetto ERC (Advanced Grant European Research Council) DOC "the Dawn of Organic Chemistry" (grant agreement No 741002). P.I.: Prof. ssa Cecilia Ceccarelli, Institut de Planétologie et Astrophysique de Grenoble (IPAG), Observatoire des Sciences de l'Univers de Grenoble (OSUG).
- Membro del progetto ASI, Agenzia Spaziale Italiana, DC-VUM-2017-034, Grant n° 2019-3 U.O Life in Space. P.I. unità: Prof.ssa Nadia Balucani, Università degli studi di Perugia
- Studente affiliato del progetto European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 811312. ACO "Astrochemical origins" P.I.: Prof.ssa Cecilia Ceccarelli Institut de Planétologie et Astrophysique de Grenoble (IPAG), Observatoire des Sciences de l'Univers de Grenoble (OSUG).
- Membro del progetto PRIN finanziato dal MUR; PRIN 2020, "Astrochemistry beyond the second period elements", Prot. 2020AFB3FX. P.I.: Prof.ssa Nadia Balucani, Università degli studi di Perugia.
- Dal 2019 collaborazione con l'azienda Master-up, azienda nata dalla collaborazione tra il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie e il Dipartimento di Matematica e Informatica dell'Università di Perugia avente come scopo principale la produzione e commercializzazione di prodotti e servizi di innovazione tecnologica, con particolare attenzione alla chimica teorica e computazionale e modellizzazione molecolare. (Tutor: Prof.ssa Noelia Faginas Lago, Dr. Dimitrios Skouteris)

RELATORE A CONGRESSI E
CONVEGNI NAZIONALI ED
INTERNAZIONALI

RELATORE CON PRESENTAZIONE
ORALE

- ICCSA 2020 - 20th International Conference on Computational Science and Its Applications - Workshop on Computational Astrochemistry, online (co-organizzata dall'Università di Cagliari) 01-04 luglio 2020. **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, M. Rosi, D. Skouteris, N. Balucani "A Theoretical Investigation of the Reactions of N(²D) with Small Alkynes and Implications for the Prebiotic Chemistry of Titan."
- EPSC 2020 - Europlanet Science Congress, online, 21 settembre - 09 ottobre 2020. **L. Mancini**, M. Rosi, N. Balucani, D. Skouteris, C. Codella, and C. Ceccarelli "Probing the Chemistry of P-Bearing Molecules in Interstellar Environments and other Extraterrestrial Environments"
- ICCSA 2021 -21st International Conference on Computational Science and Its Applications - Workshop on Theoretical and Computational Chemistry and its Applications, online (co-organizzata dall'Università di Cagliari) 13-16 settembre 2021. **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, "A Computational Analysis of the Reaction of Atomic Oxygen O(³P) with Acrylonitrile "
- JWST2021 - Astrochemistry in the JWST Era 2021 Meeting of the UK Astrochemistry Group, online 16-18 giugno 2021. **L. Mancini**, M. Rosi, N. Balucani, D. Skouteris, C. Codella, and C. Ceccarelli "Probing the Chemistry of P-Bearing Molecules in Interstellar Environments and other Extraterrestrial Environments"
- 1st International Conference - Chemical Processes in Solar-Type Star Forming Regions, Torino 13-17 settembre 2021. **L. Mancini**, M. Rosi, N. Balucani, Di. Skouteris, C. Codella, and C. Ceccarelli "Probing the Chemistry of P-Bearing Molecules in Interstellar Environments and other Extraterrestrial Environments"
- ICCSA 2022 - 22nd International Conference on Computational Science and Its Applications - Workshop on Computational Astrochemistry, online e in presenza (co-organizzata dall'Università di Malaga) 4-7 luglio 2022. **L. Mancini**, M. Trinari, E.V.F de Aragão, M. Rosi, N. Balucani "The S(⁴S)+SiH₂(¹A₁) Reaction: Toward the Synthesis of Interstellar SiS".
- ICCSA 2022 - 22nd International Conference on Computational Science and Its Applications - Workshop on Computational Astrochemistry, online e in presenza (co-organizzata dall'Università di Malaga) 4-7 luglio 2022. **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, G. Vanuzzo "A Theoretical Investigation of the Reaction of N(²D) and CN with Acrylonitrile and Implications for the Prebiotic Chemistry of Titan"
- ICCSA 2023 - 23rd International Conference on Computational Science and Its Applications - Workshop on Computational Astrochemistry, online e in presenza (co-organizzata dalla National Technical University of Athens and University of the Aegean) 3-6 luglio 2022. **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, M. Rosi "Computational Investigation of the N(²D)+C₂H₄ and N(²D)+CH₂CHCN Reactions: Benchmark Analysis and Implications for Titan's Atmosphere"
- XLIX National Congress of the Physical Chemistry Division of the SCI, Torino, 4-7 settembre 2023. **L. Mancini**, M. Rosi, D. Skouteris, F. Pirani, N. Balucani "A theoretical characterization of bimolecular reactions leading to the formation of interstellar phosphorus- and silicon-bearing molecules".
- Southern European Conference on the Science of Molecules (SECSMol), Perugia, 27-29 settembre 2023. **L. Mancini**, M. Rosi, D. Skouteris, F. Pirani, N. Balucani "A theoretical characterization of bimolecular reactions leading to the formation of interstellar phosphorus- and silicon-bearing molecules".
- Winter Workshop on Materials for Energy – wWME 2024, Bressanone (BZ) 28 gennaio - 2 febbraio 2024. **L. Mancini**, E. De Aragao, N. Faginas-Lago, A. Lombardi, Semi-empirical formulation of long range interactions: from small molecules to nanomaterials" INVITED SPEAKER
- X Workshop Nazionale Associazione Italiana di Chimica per l'Ingegneria (AICIng), Perugia, 13-14 giugno 2024. **L. Mancini**, A. Lombardi, N. Faginas-Lago "New Insights in the development of selective carbon-based nanomaterials: a computational analysis of the interaction of carbon dioxide with graphyne layers"
- 9th International Workshop on Layered & Nanostructured Materials (IWLNM 2024), Perugia, 23-26 giugno 2024. **L. Mancini**, A. Lombardi, N. Faginas-Lago "A Computational Analysis of the Interaction of Carbon Dioxide with Graphyne Layers: Towards the Development of Selective New- Generation Nanomaterials "

**RELATORE CON PRESENTAZIONE
POSTER**

- EUCO-CTC12, 12th European Conference on Computational Theoretical Chemistry, Perugia (Italia), 1-5 settembre 2019. **L. Mancini**, D. Skouteris, N. Balucani, N. Faginas-Lago, L. Podio, C. Codella, B. Lefloch and C. Ceccarelli, M. Rosi "Possible scenarios for SiS formation in star-forming regions: Electronic structure and kinetics calculations on the potential energy surfaces [SiSH] and [SiS₂H]"
- XVIII Congresso Nazionale di Scienze Planetarie, Perugia (Italia), 6-10 febbraio 2023. **L. Mancini**, M. Rosi, D. Skouteris, G. Vanuzzo, G. Pannacci, P. Liang, P. Casavecchia and N. Balucani "Unveiling the Chemistry of Nitriles in Titan's Atmosphere: The Reaction of Excited Atomic Nitrogen, N(²D), with Cyanoacetylene (HC₃N), Acrylonitrile (C₂H₃CN) and Acetonitrile (CH₃CN)".
- ACO Congress Year 4: Chemical Processes in Solar-type Star-Forming Regions, Toulouse (Francia), 5-9 giugno 2023. **L. Mancini**, M. Rosi, D. Skouteris, F. Pirani, G. Di Genova, N. Balucani, C. Ceccarelli "The S⁺ + SiH₂ Reaction: Toward the Synthesis of Interstellar SiS"
- VIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI, Scuola Normale Superiore, Pisa, 20-22 settembre 2023. **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, N. Faginas-Lago, M. Rosi, F. Pirani, D. Ascenzi "Computational Study of the Charge Exchange Process Between He⁺ and CH₃CN and CH₃OH"
- XLIX Italian Conference of Inorganic Chemistry, Perugia, 12-15 settembre 2023. **L. Mancini**, M. Rosi, D. Skouteris, F. Pirani, N. Balucani "A theoretical characterization of the reaction mechanism at the microscopic level for bimolecular reactions leading to the formation of interstellar phosphorus- and silicon- bearing molecules"

**ULTERIORE PARTECIPAZIONE A
CONGRESSI E WORKSHOPS**

- Partecipazione a "Machine Learning Meets Chemistry Colloquium", Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino, 17-18 febbraio 2020.
- Partecipazione alla conferenza "Astrochemical Frontiers 2021", online, 5-9 luglio 2021.
- Partecipazione al meeting "ACO Network Meeting Year 3", Sitges, Spagna, 9-11 maggio 2022
- Partecipazione al workshop "New Perspectives for Planetary exploration", online 26 novembre 2021.

PREMI E RICONOSCIMENTI

- Best Paper Award-22nd International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA2022); **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, G. Vanuzzo "A Theoretical Investigation of the Reaction of N(²D) and CN with Acrylonitrile and Implications for the Prebiotic Chemistry of Titan"

**DIREZIONE O PARTECIPAZIONE A
COMITATI EDITORIALI DI RIVISTE,
COLLANE EDITORIALI,
ENCICLOPEDI E TRATTATI DI
RICONOSCIUTO PRESTIGIO**

- Reviewer per le riviste Computational Science and Its Applications (ICCSA)- Lecture Notes in Computer Science (LNCS); Diamond and Related Materials; Discover Life.

**RISULTATI OTTENUTI NEL
TRASFERIMENTO TECNOLOGICO
IN TERMINI DI PARTECIPAZIONE
ALLA CREAZIONE DI NUOVE
IMPRESE (SPIN OFF), SVILUPPO,
IMPIEGO E
COMMERCIALIZZAZIONE DI
BREVETTI**

- Collaborazione con l'azienda Master-Up, uno spinoff universitario nato dalla collaborazione tra il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie e il Dipartimento di Matematica e Informatica dell'Università di Perugia che si occupa principalmente di produzione e commercializzazione di prodotti e servizi di innovazione tecnologica, con particolare attenzione allo sviluppo di software dedicati alla chimica teorica e computazionale, alla modellizzazione molecolare e alla cinetica chimica. La collaborazione si è sviluppata anche durante il periodo del dottorato di ricerca, svolto in cosupervisione (Tutor aziendale: Dr. Dimitrios Skouteris, Prof.ssa Noelia Faginas Lago).

CAPACITÀ E COMPETENZE PERSONALI	
MADRELINGUA	ITALIANO
ALTRE LINGUA	INGLESE
• Capacità di lettura	ECCELLENTE
• Capacità di scrittura	ECCELLENTE
• Capacità di espressione orale	ECCELLENTE
	FRANCESE
• Capacità di lettura	ELEMENTARE
• Capacità di scrittura	ELEMENTARE
• Capacità di espressione orale	ELEMENTARE
ALTRO	
CERTIFICAZIONI	<ul style="list-style-type: none"> • EChemTest (test elettronici, sviluppati dall'Associazione European Chemistry Thematic Network (ECTN) al fine di valutare con standard europei conoscenze e competenze chimiche in Physical Chemistry, Level 3 • European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (Universidad Autónoma de Madrid) - TCCM DIPLOMA SUPPLEMENT
CAPACITÀ E COMPETENZE RELAZIONALI	CAPACITÀ E COMPETENZE RELAZIONALI SONO STATE SVILUPPATE DURANTE L'ESPERIENZA DI STUDIO UNIVERSITARIO. TRAMITE CORSI INTENSIVI E PARTECIPAZIONE AL PROGRAMMA ERASMUS+TRAINEESHIP, IL SOTTOSCRITTO HA AVUTO LA POSSIBILITÀ DI INTERAGIRE CON STUDENTI E RICERCATORI PROVENIENTI DA AMBITI CULTURALI E PROFESSIONALI DIVERSI, IMPARANDO INOLTRE A INTERAGIRE E COMUNICARE I PROPRI RISULTATI DI RICERCA CON SCIENZIATI PROVENIENTI DA AMBITI DIVERSI, QUALI ASTRONOMI E MODELLISTI ASTROCHIMICI.
CAPACITÀ E COMPETENZE ORGANIZZATIVE	<p>BUONE ABILITÀ DI LAVORARE IN MANIERA INDIPENDENTE E IN GRUPPO, MATURATA DURANTE LA CARRIERA UNIVERSITARIA E LE ESPERIENZE ALL'ESTERO. DURANTE LA CARRIERA UNIVERSITARIA, IL SOTTOSCRITTO HA CONTRIBUITO A COLLABORARE ALL'ORGANIZZAZIONE DI CONGRESSI E SCUOLE INTERNAZIONALI, QUALI EUCO-CTC12 E XIII EM-TCCM INTENSIVE SCHOOL. IL SOTTOSCRITTO INOLTRE</p> <ul style="list-style-type: none"> - MEMBRO DEL COMITATO ORGANIZZATORE LOCALE (LOC) DEL X WORKSHOP NAZIONALE ASSOCIAZIONE ITALIANA DI CHIMICA PER L'INGEGNERIA (AICING) - MEMBRO DEL PROGRAM COMMITTEE DEL WORKSHOP "THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND ITS APPLICATIONS (TCCMA)" PER LA CONFERENZA "THE 24TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTATIONAL SCIENCE AND ITS APPLICATIONS (ICCSA 2024)"
CAPACITÀ E COMPETENZE TECNICHE	<p>OTTIMA CONOSCENZA DI SISTEMI OPERATIVI LINUX, WINDOWS E MAC OS. OTTIMA CONOSCENZA DI PROGRAMMI DI MICROSOFT OFFICE E LATEX OTTIMA CONOSCENZA DEI PROGRAMMI GAUSSIAN, MOLPRO, MOLDEN, AVOGADRO BUONA CONOSCENZA DEL LINGUAGGI DI PROGRAMMAZIONE FORTRAN</p>

SOMMARIO DELLA ATTIVITÀ DI RICERCA

- L'esperienza maturata durante il percorso di studi ed i soggiorni all'estero presso enti di ricerca ha permesso l'acquisizione di competenze nel campo della chimica teorica e computazionale, della dinamica di reazioni elementari in fase gassosa, dell'astrochimica e della chimica dei materiali inorganici.
- L'attività di ricerca è stata incentrata sullo studio teorico-computazionale (mediante metodi avanzati di chimica quantistica e previsioni statistiche) del meccanismo di reazione a livello microscopico di reazioni bimolecolari fra specie neutre in fase gassosa, ed allo sviluppo di metodologie teoriche volte allo studio di reazioni ione-neutro a livello microscopico, di particolare interesse per l'astrochimica e la chimica delle atmosfere planetarie. Particolare attenzione è stata inoltre dedicata allo studio delle interazioni intermolecolari come strumento per guidare l'analisi teorica. In aggiunta l'attività di ricerca attuale si incentra sullo studio dell'assorbimento di piccole molecole su nanomateriali a base di carbonio con applicazioni nel campo dell'energia, storage di H e tecnologie di carbon neutrality.
- Il risultato della ricerca è documentato in tredici pubblicazioni scientifiche in giornali internazionali, dodici contributi orali selezionati in conferenze internazionali, un invited speaker e quattordici contributi in volume.

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

ARTICOLI SU RIVISTE CENSITE ISI-WOS/SCOPUS

- M. Rosi, **L. Mancini**, D. Skouteris, C. Ceccarelli, N. Faginas-Lago, L. Podio, C. Codella, B. Lefloch, N. Balucani "Possible scenarios for SiS formation in the interstellar medium: Electronic structure calculations of the potential energy surfaces for the reactions of the SiH radical with atomic sulphur and S₂", *Chemical Physics Letters*, 2018, 695, 87-93. doi:10.1016/j.cplett.2018.01.053 (IF: 2.8; citazioni censite SCOPUS: 28)
- P. Liang, **L. Mancini**, D. Marchione, G. Vanuzzo, F. Ferlin, P. Recio, Y. Tan, G. Pannacci, L. Vaccaro, M. Rosi, P. Casavecchia, N. Balucani "Combined crossed molecular beams and computational study on the N(2D)+ HCCCN (X¹Σ⁺) reaction and implications for extra-terrestrial environments." *Molecular Physics*, 2021, e1948126. doi:10.1080/00268976.2021.1948126 (IF: 1.7; citazioni censite SCOPUS: 6)
- P. Recio, D. Marchione, A. Caracciolo, V.J. Murray, **L. Mancini**, M. Rosi, P. Casavecchia, N. Balucani "A crossed molecular beam investigation of the N(2D) + pyridine reaction and implications for prebiotic chemistry" *Chemical Physics Letters*, 2021, 779. doi:10.1016/j.cplett.2021.138852 (IF: 2.8; citazioni censite SCOPUS: 8)
- **L. Mancini**, G. Vanuzzo, D. Marchione, G. Pannacci, P. Liang, P. Recio, M. Rosi, D. Skouteris, P. Casavecchia, N. Balucani "The Reaction N(2D) + CH₃CCH (Methylacetylene): A Combined Crossed Molecular Beams and Theoretical Investigation and Implications for the Atmosphere of Titan" *The Journal of Physical Chemistry A*, 2021, 125(40), 8846-8859. doi:10.1021/acs.jpca.1c06537 (IF: 2.9; citazioni censite SCOPUS: 6)
- G. Vanuzzo, **L. Mancini**, G. Pannacci, P. Liang, D. Marchione, P. Recio, Y. Tan, M. Rosi, D. Skouteris, P. Casavecchia, N. Balucani, K. M. Hickson, J.-C. Loison, M. Dobrijevic "Reaction N(2D) + CH₂CCH₂(Allene): An Experimental and Theoretical Investigation and Implications for the Photochemical Models of Titan" *ACS Earth Space Chemistry* 2022, 6(10), 2305-2321. doi:10.1021/acsearthspacechem.2c00183 (IF: 3.4; citazioni censite SCOPUS: 2)
- G. Vanuzzo, D. Marchione, **L. Mancini**, P. Liang, G. Pannacci, P. Recio, Y. Tan, M. Rosi, D. Skouteris, P. Casavecchia, N. Balucani "Reaction N(2D) + CH₂CHCN (Vinyl Cyanide) Reaction: A Combined Crossed Molecular Beam and Theoretical Study and Implications for the Atmosphere of Titan" *The Journal of Physical Chemistry A*, 2022, 126, 6110-6123. doi:10.1021/acs.jpca.2c04263 (IF: 2.9; citazioni censite SCOPUS: 3)
- D. Marchione, **L. Mancini**, P. Liang, G. Vanuzzo, F. Pirani, D. Skouteris, M. Rosi, P. Casavecchia, N. Balucani "Unsaturated Dinitriles Formation Routes in Extraterrestrial Environments: A Combined Experimental and Theoretical Investigation of the Reaction between Cyano Radicals and Cyanoethene (C₂H₃CN)" *The Journal of Physical Chemistry A*, 2022, 126, 3569-3582 doi:10.1021/acs.jpca.2c01802 (IF: 2.9; citazioni censite SCOPUS: 8)
- E.V.F de Aragão, **L. Mancini**, N. Faginas-Lago, M. Rosi, D. Skouteris, F. Pirani "Semiempirical Potential in Kinetics Calculations on the HC₃N + CN Reaction" *Molecules* 2022, 27, 2297. doi:10.3390/molecules27072297 (IF: 4.6; citazioni censite SCOPUS: 1)

CONTRIBUTI SU VOLUMI CENSITI
ISI-WOS/SCOPUS

- V. Richardson, E.V.F de Aragão, X. He, F. Pirani, **L. Mancini**, N. Faginas-Lago, M. Rosi, L. M. Martini, D. Ascenzi "Fragmentation of interstellar methanol by collisions with He⁺: an experimental and computational study" *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2022, 24, 22437–22452. doi:10.1039/D2CP02458F (IF: 3.3; citazioni censite SCOPUS: 2)
- P. Liang, E.V.F de Aragão, L. Giani, **L. Mancini**, G. Pannacci, D. Marchione, G. Vanuzzo, N. Faginas-Lago, M. Rosi, D. Skouteris, P. Casavecchia, N. Balucani, "The OH(²π) + C₂H₄ Reaction: A Combined Crossed Molecular Beam and Theoretical Study". *The Journal of Physical Chemistry A*, 2023, 127, 4609–4623. doi:10.1021/acs.jpca.2c08662 (IF: 2.9)
- G. Pannacci, **L. Mancini**, G. Vanuzzo, P. Liang, D. Marchione, M. Rosi, P. Casavecchia, N. Balucani "Combined crossed-beams and theoretical study of the O(³P-¹D)+acrylonitrile (CH₂CHCN) reactions and implications for combustion and extraterrestrial environments" *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, 25, 20194-2021. DOI: 10.1039/D3CP01558K (IF: 3.3)
- L. Giani, C. Ceccarelli, **L. Mancini**, E. Bianchi, F. Pirani, M. Rosi, N. Balucani "Revised gas-phase formation network of methyl cyanide: the origin of methyl cyanide and methanol abundance correlation in hot corinos". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2023, 526(3), 4535-4556. (IF: 4.8)
- **L. Mancini**, M. Rosi, D. Skouteris, G. Vanuzzo, G. Pannacci, P. Casavecchia, N. Balucani "A computational characterization of the reaction mechanisms for the reactions N(²D) + CH₃CN and HC₃N and implications for the nitrogen-rich organic chemistry of Titan" *Computational and Theoretical Chemistry* Computational and Theoretical Chemistry, 2023, 1229, 114341. (IF: 2.8)
- Y. Apriliyanto, A. Lombardi, **L. Mancini**, F. Pirani, N. Faginas-Lago "Revisiting Numerical Solutions of Weakly Bound Noble Gases' Vibrational Energy Levels Modeled by the Improved Lennard-Jones Potential" *ChemPhysChem*, submitted
- **L. Mancini**, E.V.F. de Aragão, F. Pirani, M. Rosi, N. Faginas-Lago, V. Richardson, L. M. Martini, L. Podio, M. Lippi, C. Codella, D. Ascenzi "Destruction of interstellar acetonitrile (CH₃CN) via collisions with He⁺ ions", final stage of preparation.
- **L. Mancini**, F. Pirani, A. Lombardi, N. Faginas-Lago "Modeling the confinement of small molecules on carbon-based nano-materials through accurate force field parameters: review and new insights", final stage of preparation.

- D. Skouteris, M. Rosi, N. Balucani, **L. Mancini**, N. Faginas-Lago, L. Podio, C. Codella, B. Lefloch and C. Ceccarelli "A Theoretical Investigation of the Reaction H+SiS₂ and Implications for the Chemistry of Silicon in the Interstellar Medium", In: Gervasi O. et al. (eds) *Computational Science and Its Applications – ICCSA 2018*. ICCSA 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol 10961. Springer, Cham. doi: 10.1007/978-3-319-95165-2_50 (citazioni censite SCOPUS: 1)
- M. Rosi, D. Skouteris, N. Balucani, **L. Mancini**, N. Faginas-Lago, L. Podio, C. Codella, B. Lefloch and C. Ceccarelli "Electronic Structure and Kinetic Calculations for the Si+SH reaction, a Possible Route of SiS formation in Star-Forming Regions", In: Misra S. et al. (eds) *Computational Science and Its Applications – ICCSA 2019*. ICCSA 2019. Lecture Notes in Computer Science, vol 11621. Springer, Cham doi: 10.1007/978-3-030-24302-9_22 (citazioni censite SCOPUS: 3)
- D. Skouteris, **L. Mancini**, F. Vazart, C. Ceccarelli, M. Rosi, N. Balucani "A Theoretical Investigation of the Reaction Between Glycolaldehyde and H⁺ and Implications for the Organic Chemistry of Star Forming Regions." In: Gervasi O. et al. (eds) *Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020*. ICCSA 2020. Lecture Notes in Computer Science, vol 12251. Springer, Cham. doi: 10.1007/978-3-030-58808-3_53
- E.V.F. de Aragão, N. Faginas-Lago, M. Rosi, **L. Mancini**, N. Balucani, D. Skouteris. "A Computational Study of the Reaction Cyanoacetylene and Cyano Radical Leading to 2-Butynedinitrile and Hydrogen Radical." In: Gervasi O. et al. (eds) *Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020*. ICCSA 2020. Lecture Notes in Computer Science, vol 12251. Springer, Cham doi: 10.1007/978-3-030-58808-3_51 (citazioni censite SCOPUS: 2)
- **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, M. Rosi, D. Skouteris, N. Balucani "A Theoretical Investigation of the Reactions of N(²D) with Small Alkynes and Implications for the Prebiotic Chemistry of Titan. In *Computational Science and Its Applications–ICCSA 2020: 20th International Conference, Cagliari, Italy, July 1–4, 2020, Proceedings, Part III 20* (pp. 717-729). Springer International Publishing. doi: 10.1007/978-3-030-58808-3_52

- **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, "A Computational Analysis of the Reaction of Atomic Oxygen O(³P) with Acrylonitrile " In International Conference on Computational Science and Its Applications (pp. 339-350). Cham: Springer International Publishing. doi:10.1007/978-3-030-87016-4_25
- E.V.F de Aragão, **L. Mancini**, N. Faginas-Lago, M. Rosi, N. Balucani, F. Pirani "Long-Range Complex in the HC₃N + CN Potential Energy Surface: Ab Initio Calculations and Intermolecular Potential" In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. ICCSA 2021. Lecture Notes in Computer Science, vol 12958, 413-425. Springer, Cham. doi:10.1007/978-3-030-87016-4_31 (citazioni censite SCOPUS: 1)
- A. Lombardi, **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, L. Giani "The CH₂CH₂+ OH Gas Phase Reaction: Formaldehyde and Acetaldehyde Formation Routes" In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. ICCSA 2021. Lecture Notes in Computer Science, vol 12953, 581-593. Springer, Cham doi: 10.1007/978-3-030-86976-2_39
- **L. Mancini**, M. Trinari, E.V.F de Aragão, M. Rosi, N. Balucani "The S⁺⁽⁴S)+SiH₂(¹A₁) Reaction: Toward the Synthesis of Interstellar SiS". In International Conference on Computational Science and Its Applications (pp. 233-245). Cham: Springer International Publishing. doi:10.1007/978-3-031-10562-3_17
- **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, G. Vanuzzo "A Theoretical Investigation of the Reaction of N(²D) and CN with Acrylonitrile and Implications for the Prebiotic Chemistry of Titan". In International Conference on Computational Science and Its Applications (pp. 246-259). Cham: Springer International Publishing. doi:10.1007/978-3-031-10562-3_18
- E.V.F de Aragão, **L. Mancini**, X. He, N. Faginas-Lago, M. Rosi, D. Ascenzi, F. Pirani "Coding Cross Sections of an Electron Charge Transfer Process" In: Gervasi O. et al. (eds) 2022 Workshops, LNCS 13382, 319-333. doi: 10.1007/978-3-031-10592-0_24
- N. Faginas-Lago, E.V.F de Aragão, **L. Mancini**, M. Rosi, D. Ascenzi, F. Pirani "Coding Cross Sections of an Electron Charge Transfer Process: Analysis of Different Cuts for the Entrance and Exit Potentials". In: International Conference on Computational Science and Its Applications. Cham: Springer Nature Switzerland, 2023. p. 162-175. doi:10.1007/978-3-031-37126-4_12
- M. Rosi, N. Balucani, P. Casavecchia, N. Faginas-Lago, **L. Mancini**, D. Skouteris, G. Vanuzzo "A Computational Study of the Reaction Between N (²D) and Simple Aromatic Hydrocarbons". In International Conference on Computational Science and Its Applications 2023 (pp. 718-734). Cham: Springer Nature Switzerland. doi:10.1007/978-3-031-37108-0_46
- **L. Mancini**, E.V.F de Aragão, M. Rosi "Computational Investigation of the N(²D) +C₂H₄ and N(²D)+CH₂CHCN Reactions: Benchmark Analysis and Implications for Titan's Atmosphere". In International Conference on Computational Science and Its Applications (pp. 705-717). Cham: Springer Nature Switzerland. doi: 10.1007/978-3-031-37108-0_45

Il sottoscritto **Luca Mancini** dichiara che tutti i fatti riportati nel presente curriculum corrispondono a verità ai sensi e per gli effetti degli artt. 46 e 47 del D.P.R. 445/2000.

Il sottoscritto dichiara di essere a conoscenza delle sanzioni penali cui incorre in caso di dichiarazione mendace o contenente dati non più rispondenti a verità, come previsto dall'art. 76 del D.P.R. 28.12.2000, n. 445.

Il sottoscritto dichiara di essere a conoscenza dell'art. 75 del D.P.R. 28.12.2000, n. 445, relativo alla decadenza dai benefici eventualmente conseguenti al provvedimento emanato, qualora l'Amministrazione, a seguito di controllo, riscontri la non veridicità del contenuto della suddetta dichiarazione.

Si allega a tale scopo copia del documento di identità in corso di validità

Perugia, 24/06/2024

(luogo e data)

Firma 