Europass Curriculum Vitae

Updated 20 novembre 2024

Personal information

Name / Surname	**M. Noelia Faginas Lago**
Personal Email	noelia.faginaslago@unipg.it
Nationality	Spagnola

POSIZIONE ATTUALE

Date (da - a)	Dal 28/11/2022 ad oggi
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
Tipo di azienda o settore	Professore seconda fascia SC 03/B1 – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici – S.S.D. CHIM/03 – Chimica generale ed inorganica

Esperienza Lavorativa

Date (da - a)	Dal 29/11/2019 al 28/11/2022
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
Tipo di azienda o settore	Ricercatore universitario a t.d. B- Ricercatore a t.d - t. pieno (art.24 c.3-a L. 240/10)
Principali mansioni e responsabilità	Ricerca scientifica e didattica. Titolo del progetto nel bando di selezione: "Studio teorico-computazionale della dinamica dei processi chimici elementari di interesse in astrochimica e nella produzione/trasferimento di energia". L'attività di ricerca è stata dedicata allo sviluppo di programmi di calcolo intensivo per lo studio computazionale della dinamica dei processi chimici elementari. Si sono applicate tecniche quantistiche e classiche per il calcolo accurato delle probabilità di reazione e dei relativi osservabili sperimentali

Date (da - a)	06/07/2018 – 05/07/2019
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
Tipo di azienda o settore	Ricercatore universitario a t.d.- Ricercatore a t.d - t. pieno (art.24 c.3-a L. 240/10)
Principali mansioni e responsabilità	Proroga del contratto sotto riportato (per i dettagli vedi sotto)

Date (da - a)	06/07/2015 – 05/07/2018
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia
Tipo di azienda o settore	Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
Ricercatore universitario a t.d.- Ricercatore a t.d - t. definito (art.24 c.3-a L. 240/10)	
Principali mansioni e responsabilità	Ricerca scientifica e didattica. Titolo del progetto nel bando di selezione: "Studio teorico-computazionale della dinamica dei processi chimici elementari di interesse in astrochimica e nella produzione/trasferimento di energia". L'attività di ricerca è stata dedicata allo sviluppo di programmi di calcolo intensivo per lo studio computazionale della dinamica dei processi chimici elementari. Si sono applicate tecniche quantistiche e classiche per il calcolo accurato delle probabilità di reazione e dei relativi osservabili sperimentali.

Date (da - a)	01/01/2014 – 05/07/2015 (**18 mesi)**
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia
Tipo di azienda o settore	Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
Tipo di impiego	Assegnista di Ricerca (rinnovo)
Principali mansioni e responsabilità	Titolo della Ricerca: "Approcci computazionali concorrenti alla reattività chimica: applicazioni di scienze computazionali alla modellistica del rientro nell'atmosfera di Giove" SSD: CHIM/03
Date (da - a)	01/01/2012– 31/12/2013 (**24 mesi)**
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia
Tipo di azienda o settore	Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
Tipo di impiego	Assegnista di Ricerca
Principali mansioni e responsabilità	Titolo della Ricerca: "Approcci computazionali concorrenti alla reattività chimica: applicazioni di scienze computazionali alla modellistica del rientro nell'atmosfera di Giove" SSD: CHIM/03 L'attività di ricerca è la prosecuzione dall progetto di cui sotto.
Date (da - a)	01/01/2011 – 31/12/2011 (**12 mesi)**
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia
Tipo di azienda o settore	Dipartimento di Chimica
Tipo di impiego	Collaborazione coordinata continuativa (co.co.co)
Principali mansioni e responsabilità	Titolo della Ricerca: "Approcci computazionali concorrenti alla reattività chimica: applicazioni di scienze computazionali alla modellistica del rientro nell'atmosfera di Giove" SSD: CHIM/03. L'attività di ricerca all'interno del progetto FP7-Space-2009-1 Grant Agreement n. 242311 era rivolta allo studio la dinamica dei sistemi chimici semplici e complessi per la modellistica del rientro nell'atmosfera di Giove utilizzando tre diversi strumenti: dinamiche quantistiche sia esatte che approssimate, traiettorie classiche e dinamica molecolare.
Date (da - a)	01/02/2009 – 31/12/2010 (**10 mesi)**
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia
Tipo di azienda o settore	Dipartimento di Chimica
Tipo di impiego	Collaborazione coordinata continuativa (co.co.co)
Principali mansioni e responsabilità	Titolo della Ricerca: "Approcci computazionali concorrenti alla reattività chimica: applicazioni di scienze computazionali alla modellistica della qualità dell'aria in Umbria" SSD: CHIM/03. L'attività di ricerca era rivolta a svolgere calcoli di Dinamica Molecolare classica, usando il codice DL_POLY per la modellistica dei componenti dell'aria.
Date (da - a)	01/12/2002 – 31/01/2009 (**74 mesi)**
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia
Tipo di azienda o settore	Dipartimento di Chimica
Tipo di impiego	Assegnista di Ricerca
Principali mansioni e responsabilità	Titolo della Ricerca: "Approcci computazionali concorrenti alla reattività chimica" SSD: CHIM/03. L'attività di ricerca era rivolta all'implementazione accurata dei metodi MCTDH e SC-IVR nella infrastruttura di computer distribuiti GRID. Questa implementazione ha reso possibile calcoli massivi per i sistemi leggeri (come H +H2) e più pesanti (come N +N2) fornendo risultati dettagliati delle proprietà delle reazioni atomo-diatomo, tramite il calcolo delle probabilità di reazione cumulative e dei valori delle costanti di velocità termiche.

CONTRATTI PER LA DIDATTICA (oltre alla didattica tenuta nel ruolo di Professore di I fascia)

· Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occasionale, A.A 2008/2009 - Università degli studi di Perugia. Attività di Tutorato retribuita per il corso ufficiale "Chimica e Biochimica" (CHIM/03) del Corso di Laurea Interdipartimentale in Produzioni Animali per **25 ore**.

· Contratto di lavoro autonomo di collaborazione coordinata e continuativa (docente a contratto per corso ufficiale) A.A 2008/2009-Università degli studi di Perugia. Docente del corso di "Gestione in rete di basi di conoscenza molecolari" (CHIM/03) nel CdL Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN per 48 ore; 6 CFU.

· Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occasionale, A.A 2008/2009 - Università degli studi di Perugia. Titolare di un modulo per il corso "Chimica Computazionale" della Laurea Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN per 8 ore; 1 CFU.

· Contratto di lavoro autonomo di collaborazione coordinata e continuativa (docente a contratto per corso ufficiale) A.A 2007/2008-Università degli studi di Perugia. Docente del corso di "Gestione in rete di basi di conoscenza molecolari" (CHIM/03 - 6 CFU) nel CdL Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN per 48 ore; 6 CFU

· Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occasionale, A.A 2004/2005; 2002/2003 - Università degli studi di Perugia. Attività di Tutorato ufficiale per il corso "Chimica Computazionale" (CHIM/03) della Laurea Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN per 10 ore.

ESPERIENZA LAVORATIVA PRESSO AZIENDE PRIVATE

Date (da - a)	Dal .....2019 – oggi
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-tec srl (https://www.master-tec.it/) - .....- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Production and marketing of technological innovation products and services, with particular focus on theoretical and computational molecular modelling
Tipo di impiego	Socio fondatore
Principali mansioni e responsabilità	Responsabile dell'area ricerca.....

Date (da - a)	Dal 08/07/2019 – 28/11/2019
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) - Strada vicinale Sperandio, 15- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci astrochimici
Tipo di impiego	Ricercatore- Supervisore scientifico.
Principali mansioni e responsabilità	Responsabile dell'unità locale del progetto europeo H2020-MSCA-ITN-2018 GRANT agreement : 811312. AstroChemical Origins Project Acronym : ACO Titolo: Quantum chemical computations on gas phase neutral-neutral reactions of interstellar molecules. P.I: Prof. ssa Cecilia Ceccareli (IPAG, Grenoble- Francia). Supervisore dello studente di dottorato Emilia de Aragao. L'attività di ricerca riguarda lo studio teorico (calcoli delle superficie di energia potenziale e calcoli dinamici) di reazioni in fase gassosa di interesse astrochimico

Date (da - a)	Dal 2006 al 2016
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) - Strada vicinale Sperandio, 15- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci molecolari
Principali mansioni e responsabilità	Presidente di MASTER-UP srl (spin-off Universitario). Dal Luglio 2016 sono socio collaboratore di MASTER-UP srl (per dettagli si veda voce TERZA MISSIONE).

Date (da - a)	ottobre-dicembre 2018
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) -Via Elce di Sotto 8- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci molecolari
Tipo di impiego	Prestazione di lavoro autonomo occasionale
Principali mansioni e responsabilità	Gestione scientifica e amministrativa dell'organizzazione del congresso EUCO2019
Date (da - a)	26 settembre-05 dicembre 2016
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) -Via Elce di Sotto 8- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci molecolari
Tipo di impiego	Prestazione di lavoro autonomo occasionale
Principali mansioni e responsabilità	Gestione e organizzazione scuola "Open Science Cloud" dal 04 al 10 giugno 2017, Perugia
Date (da - a)	10-18 maggio 2012
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) -Via Elce di Sotto 8- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci molecolari
Tipo di impiego	Prestazione di lavoro autonomo occasionale
Principali mansioni e responsabilità	Gestione segreteria e gestione spazi per lo svolgimento della conferenza PM2012
Date (da - a)	11-30 maggio 2011
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) -Via Elce di Sotto 8- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci molecolari
Tipo di impiego	Prestazione di lavoro autonomo occasionale
Principali mansioni e responsabilità	Assemblaggio, grafica e gestione della pubblicazione Domain Committee "CMST" COST Action D37
Date (da - a)	19 novembre-16 dicembre 2008
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) -Via Elce di Sotto 8- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci molecolari
Tipo di impiego	Prestazione di lavoro autonomo occasionale
Principali mansioni e responsabilità	Realizzazione software per simulazioni di dinamica molecolare per sistemi di interesse
Date (da - a)	16-12-2004 al 31-12-2004
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Master-up srl (www.master-up.it) -Via Elce di Sotto 8- Perugia (Italia)
Tipo di azienda o settore	Sviluppo di strumenti computazionali per approcci molecolari
Tipo di impiego	Collaborazione coordinata continuativa (co.co.co)
Principali mansioni e responsabilità	Attività di analisi e valutazione di 4 prodotti virtuali relativi a misurazioni di spettroscopia UV, IR fiamma e titolazioni Acido-Base
Date (da - a)	
Nome e indirizzo del datore di Lavoro	Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
Tipo di azienda o settore	
Principali mansioni e responsabilità	

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

• Date (da - a)	1999-2002
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Corso di Dottorato di Ricerca in scienze Chimiche (XV ciclo) presso l'Università degli Studi di Perugia.
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Perugia. Titolo della Tesi: "Advances in non orthogonal coordinates dynamics: classical, semiclassical and quantum approaches". Dissertazione in data 20 dicembre 2002
• Date (da - a)	1995-1999
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Licenciada en Ciencias Químicas (07 settembre 1999) conseguito presso La Universidad de Salamanca (Spagna)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Titolo equivalente alla Laurea Magistrale in Scienze Chimiche.

ALTRO:

• Date (da - a)	22-24 Febbraio 2011
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	CASPUR (Consorzio interuniversitario per le applicazioni di Supercalcolo per Università e Ricerca)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Corso di "Dinamica Molecolare classica per la simulazione di sistemi biologici"
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Attestato di partecipazione
• Date (da - a)	2011
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Crocevia Linguistico, Perugia (Italia)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Corso di Lingua "Lingua Araba- Livello A1"
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Certificato Livello A1.
• Date (da - a)	29 marzo -01 aprile 2010
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Partecipazione alla scuola europea "Hands on Training School on Molecular and Material Science GRID Applications", Miramare, Trieste (Italia)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Esercitazioni all'uso della Grid (scienze molecolari e dei materiali).
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Attestato di partecipazione.
• Date (da - a)	15-18 settembre 2008
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Partecipazione alla scuola europea"Joint EU-IndiaGRID/CompChem GRID Tutorial on chemical and material science applications", Miramare, Trieste (Italia)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Addestramento all'uso della Grid dal punto di vista dell'implementazione di codici e gestionale.

• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Attestato di partecipazione.
• Date (da - a)	1-7 agosto 2007
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Partecipazione alla scuola “41st “International School of Quantum Electronics on Molecular Physics and Plasmas in Hypersonics”, Erice-Sicilia (Italia)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Chimica quantistica, dinamica molecolare in fase gassosa.
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Attestato di partecipazione.
• Date (da - a)	17-18 maggio 2007
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Partecipazione alla scuola “Writing to comunicate science: a practical workshop”, Firenze (Italia)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Impostazione scientifica di un articolo scientifico o progetto europeo.
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Attestato di partecipazione.
• Date (da - a)	10 febbraio 1999
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Universität Bielefeld (Germania)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Corso di Lingua “Deutsch als Fremdsprache “Abschlussprüfung Deutsch als Fremdsprache”
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Certificato con voto “sehr gut”. (molto buono).
• Date (da - a)	07 maggio 1999
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Universität Bielefeld (Germania)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Corso di Lingua “Italian language “Italiano e Spagnolo: un confronto”
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Certificato Italienish I.
• Date (da - a)	01/10/1998 - 26/07/1999
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Borsa di studio programma Socrates/Erasmus per un soggiorno di studi presso la Università Bielefeld (Germania)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Certificato
• Date (da - a)	17-19 aprile 1997
• Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione	Universidad de Salamanca (Spagna)
• Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio	Partecipazione alle 2as Jornadas ambientales - Gestion y tratamientos de residuos
• Livello nella classifica nazionale (se pertinente	Attestato di partecipazione.

ESPERIENZE POST-DOTTORATO ESTERO

• Date (da - a) marzo 2008 - aprile 2008

• Descrizione Marie Curie Host Fellowship (MTKD-CT-2005-029583) presso il gruppo del Prof. Stavros Farantos Foundation for Research and Technology -Hellas (FORTH), Creta (Grecia). Tema della ricerca: Trasferimento di conoscenze di chimica computazionale implementate in Grid: COMPCHEM Grid

• Principali mansioni e responsabilità Ricerca Scientifica

• Date (da - a) 2003-2006

• Descrizione Borsa post-dottorato per la formazione di ricercatori "Formación de investigadores, modalidad postdoctotal E" (BFI03.163) presso il gruppo del Prof. Ernesto García Para, Facultad de Ciencias y Tecnologia, Vitoria (Spagna).Tema della Ricerca: Sistema di coordinate non ortogonali in dinamica delle reazioni chimiche.

• Principali mansioni e responsabilità Ricerca Scientifica

SOGGIORNI DI RICERCA ALL'ESTERO

• Date (da - a) ottobre 2010- novembre 2010

• Descrizione "Access to Barcelona Supercomputing facilities" del progetto "HPC-Europe2" (contract n. 228398), Barcelona (Spagna). (Prof. Responsabile Fermin Huarte-Larrañaga) Titolo del progetto: Quantum (MCTDH) and Semiclassical approaches (SC-IVR) to evaluate rate coefficients and implementation of the final state projections in flux correlation calculation of reaction cross sections.

• Principali mansioni e responsabilità Ricerca Scientifica

• Date (da - a) maggio 2010

• Descrizione Short Term Scientific Mission (COST-STSM-D37-05964) presso il gruppo della Prof.ssa Margarita Albertí (Universitat de Barcelona), Barcelona (Spagna). Titolo del progetto: Implementation of the NMA-NMA and NMA-H2O in the Grid.

• Principali mansioni e responsabilità Ricerca Scientifica

• Date (da - a) febbraio 2009 - marzo 2009

• Descrizione Short Term Scientific Mission (COST-STSM-D37-04418) presso il gruppo del Prof. Fermin Huarte-Larrañaga, Parc Cientific de Barcelona (Spagna). Titolo del progetto: An alternative coordinate set for Grid implemented MultiConfigurational Time Dependent Hartree (MCTDH) approaches.

• Principali mansioni e responsabilità Ricerca Scientifica

• Date (da - a) febbario 2008

• Descrizione Short Term Scientific Mission (COST-STSM-D37-03472) presso il gruppo del Prof. Fermin Huarte-Larrañaga, Parc Cientific de Barcelona, (Spagna). Titolo del progetto: Implementation of a Semiclassical- Inital Value Representation (SC- IVR) program in the Grid environment to calculate atom-diatom rate coefficients and compare with MultiConfigurational Time Dependent Hartree (MCTDH) results

• Principali mansioni e responsabilità Ricerca Scientifica

• Date (da - a)	novembre 2006-dicembre 2006
• Descrizione	Short Term Scientific Mission (COST-STSM-D37-02415) presso il gruppo del Prof. Ernesto García Para, Departamento de Quimica Fisica, Universidad Pais Vasco, Vitoria (Spagna).
• Principali mansioni e responsabilità	Ricerca Scientifica
• Date (da - a)	aprile 2003- luglio 2003
• Descrizione	Soggiorno di studio per collaborazione scientifica presso il gruppo del Prof. Xavier Guiménez, (Universitat de Barcelona), Barcelona (Spagna). Tema di ricerca: Calcoli delle costanti di velocità per reazioni elementari in fase gassosa usando metodi semiclassici moderni e dinamica delle reazioni chimiche.
• Principali mansioni e responsabilità	Ricerca Scientifica

ABILITAZIONI

• Anno	2023 (Tornata 2021)
• Tipo	Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia nel Settore Concorsuale 03/B1 - FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI, con validità dal 06/02/2023 al 06/02/2034
• Anno	2023 (Tornata 2021)
• Tipo	Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario di Prima Fascia nel Settore Concorsuale 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE., con validità dal 06/02/2023 al 06/02/2034
• Anno	2017 (Tornata 2016)
• Tipo	Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di seconda fascia di cui all'articolo 16 della L. 240/2010 nel settore concorsuale 03/B1 (FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI), con validità dal 12/04/2017 al 12/04/2028).
• Anno	2017 (Tornata 2016)
• Tipo	Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di seconda fascia di cui all'articolo 16 della L. 240/2010 nel settore concorsuale 03/B2 ((FONDAMENTI CHIMICI DELLE TECNOLOGIE), con validità dal 28/03/2017 al 28/03/2028).
• Anno	2017 (Tornata 2016)
• Tipo	Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore di seconda fascia di cui all'articolo 16 della L. 240/2010 nel settore concorsuale 03/A2 (MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE 10/04/2017 al 10/04/2028).
• Anno	2006 – ad oggi
• Tipo	Abilitazione Spagnola (senza limite temporale) a Professor Lector e Professore collaboratore nell'ambito di Scienze Chimiche (conferita dall'Agència per la Qualitat del Sistema Universitari de Catalunya).

RICONOSCIMENTI PER L'ATTIVITÀ SCIENTIFICA

Attività editoriale

· 2024 – ad oggi. Editore del Conference Proceedings “Computational Science and Its Applications – ICCSA 2024; 24th International Conference, Hanoi, Vietnam, July 1–4, 2024, Proceedings, "Part I, Part II, Part III and Part IV". Springer (https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-031-64608-9)

·2019. Guest Editor of the “Special Issue "Carbon Nanostructures: From quantum Calculations to Molecular Dynamics Simulations" nel giornale “C Journal of Carbon research” (https://www.mdpi.com/journal/carbon/special_issues/nanocarbon_calculations_molecular_dynamics_simulations

· Noelia Faginas Lago, A. Laganà "Foreword", Future Generation Computer Systems 20, 701-702 DOI:0.1016/j.future.2003.11.014 (2004).

·A. Riganelli, Noelia Faginas Lago Foreword Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering 2, 310 (2002).

• Date (da - a) 31 gennaio 2022 al 4 maggio 2022

• Descrizione Membro della commissione esaminatrice dei concorsi per l’arma dei trasporti e dei Materiali e per il corpo degli ingegneri

• Date (da - a) Maggio 2021 ad oggi

• Descrizione Delegato Internazionalizzazione e Programma Erasmus del Dipartimento di Chimica,Biologia e Biotechnologie dell’Universita` degli Studi di Perugia (http://www.dcbb.unipg.it/delegati)

• Date (da - a) luglio 2020

• Descrizione Membro della commissione esaminatrice per il Master TCCM presso L’Universidad Autonoma de Madrid (Spagna)

• Date (da - a) 15 febbraio 2019 ad oggi

• Descrizione iscrizione a REPRISE (albo degli esperti scientifici istituito presso il MIUR) per la ricerca di base

• Date (da - a) Aprile 2018 ad aprile 2024

• Descrizione Membro dell’Administrative Council (AC) della associazione europea “European Chemistry Thematic Network”

• Date (da - a) 03-06 Luglio 2017

• Descrizione Premio all’organizzazione del workshop "Chemistry and Materials Sciences and Technologies” CMST 2017 con il leadership certificate “ICCSA2017- 17th International Conference on Computational Science and Applications Trieste (Italia), 03-06 Luglio 2017”

• Date (da - a) 04-07 Luglio 2016

• Descrizione BEST PAPER AWARD of the ICCSA2016- 16th International Conference on Computational Science and Applications Beijing (Cina), 04-07 Luglio 2016 TITOLO: A Theoretical study on the relevance of protonated and ionized species of methanimine and methanol in astro-chemistry.

• Date (da - a) 04-07-2016 al 07-07-2016

• Descrizione Premio per l’organizzazione del workshop "Chemistry and Materials Sciences and Technologies” CMST 2016 con il leadership certificate “ICCSA2016- 16th International Conference on Computational Science and Applications Beijing (Cina), 04-07 Luglio 2016”.

• Date (da - a) 02-08-2016 ad oggi

• Descrizione Membro della Commissione per la Concessione del Nullaosta per l’iscrizione alla Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell’Università di Perugia.

• Date (da - a) 01.11.2015– ad maggio 2021

• Descrizione | Membro della commissione per i referenti accordi Erasmus e Membro della Commissione Erasmus+ del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie (http://www.chm.unipg.it/erasmus)

• Date (da - a) | 01.11.2009– ad oggi
• Descrizione | Affiliazione alla Società Chimica Italiana (SCI) dal 2009. Divisione Chimica Teorica e Computazionale.

• Date (da - a) | 28/03/2007– 2018
• Descrizione | Cultrice della materia - Facoltà di SS.MM.FF.NN. per il SSD CHIM/03.

SOMMARIO DELLA ATTIVITÀ DI RICERCA

· Le esperienze professionali sia in campo accademico che aziendale hanno consentito alla sottoscritta di acquisire competenze nel campo della chimica teorica e computazionale e nei temi tipici della chimica generale e inorganica e della astrochimica.

· L'attività di ricerca della sottoscritta è stata incentrata sullo studio teorico-computazionale della dinamica dei processi chimici elementari di interesse in vari campi applicativi con particolare attenzione per: 1) sviluppo di approcci basati sul calcolo intensivo per lo studio della dinamica dei processi elementari di interesse per l'astrochimica e la chimica delle atmosfere planetarie e le relative simulazioni dei processi di produzione/trasferimento di energia. 2) calcolo accurato di coefficienti di velocità con proiezione della popolazione sugli stati finali dei prodotti usando l'approccio Multi Configuration Time Dependent Hartree (MCTDH). 3) caratterizzazione di interazioni intermolecolari e calcolo di dinamica molecolare classica per implementazioni mediante l'utilizzo di programmi quali DL_POLY, opportunanemente modificato, per lo studio di metodi di stoccaggio di gas mediante adsorbimento sui vari tipi di nanostrutture, quali single wall nanotube (SWNT), grafene, grafino ed altre. A questo proposito, le simulazioni di dinamica molecolare basate su potenziali di interazione intermolecolari accurati hanno dimostrato di essere un potente strumento per descrivere l'adsorbimento e per ricavare informazioni energetiche ad una certa temperatura e per un insieme canonico.

PUBBLICAZIONI

Date (da - a) | 2002 - ad oggi
Tipologia | L'attività di ricerca è comprovata da 117 pubblicazioni scientifiche ; prodotti censiti da WOS:116, Scopus: 109.

Indici bibliometrici | h-index 26, n° citazioni WOS (all databases):1706; n° citazioni scopus: 1633; Google Scholar: 1869 (citazione risultanti alla data del 20.11.2024)

LISTA DI PUBBLICAZIONI

117 Luca Mancini, Emília Valença Ferreira de Aragão, Fernando Pirani, Marzio Rosi, **Noelia Faginas-Lago**, Vincent Richardson, Luca Matteo Martini, Linda Podio, Manuela Lippi, Claudio Codella, and Daniela Ascenzi. *Destruction of interstellar methyl cyanide (CH_3CN) via collisions with He^+ ions* Astronomy & Astrophysics, 691, A83 (2024), DOI:10.1051/0004-6361/202451674

116. Gyeongjin Park, Evans C. Wralstad, **Noelia Faginas-Lago**, Kevin Qian, Ronald T. Raines, Giovanni Bistoni, and Christopher C. Cummins; *Pentaphosphorylation via the Anhydride of Dihydrogen Pentametaphosphate: Access to Nucleoside Hexa- and Heptaphosphates and Study of Their Interaction with Ribonuclease A* ACS Central Science 2024 10 (7), 1415-1422. DOI: 10.1021/acscentsci.4c00835

.

115 Luca Mancini, Gianmarco Vanuzzo, Pedro Recio, Adriana Caracciolo, **Noelia Faginas-Lago**, Marzio Rosi, Piergiorgio Casavecchiaa„ and Nadia Balucani: *Unveiling the Reaction Mechanism of the N(^{2}D) + Pyridine Reaction: Ring-contraction Channels versus 7-Membered Ring Formation Channels* JPCA 2024, DOI: 10.1021/acs.jpca.4c02924

114. Yusuf Bramastya Apriliyanto, Andrea Lombardi, Luca Mancini, Fernando Pirani and **Noelia Faginas Lago (corresponding author)**, Fernando Pirani; *Revisiting Numerical Solutions of Weakly Bound Noble Gases'Vibrational Energy Levels Modeled by the Improved Lennard-Jones Potential* ChemPhysChem vol, 2024 DOI: 10.1002/cphc.202400223.

113. Mancini, L., de Aragão, E.V.F., Pirani, F., Rosi, M.,**Noelia Faginas Lago**, Ascenzi, D. (2024). The He^+ + CH_3CN Charge-Exchange Reaction: A Combined Semi-empirical and Quantum Chemical Study. In: Gervasi, O., Murgante, B., Garau, C., Taniar, D., C. Rocha, A.M.A., Faginas Lago, M.N. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2024 Workshops. ICCSA 2024. Lecture Notes in Computer Science, vol 14818. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-65273-8$_3$

112. Anguita-Ortiz, N., Lombardi, A., **Noelia Faginas Lago**, Nogueira, J.J. (2024). Insights into Ion Conduction Mechanisms Through the ORF3a Channel by Computational Modelling. In: Gervasi, O., Murgante, B., Garau, C., Taniar, D., C. Rocha, A.M.A., Faginas Lago, M.N. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2024 Workshops. ICCSA 2024. Lecture Notes in Computer Science, vol 14823. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-65329-2$_2$7

111. Mancini, L., Lombardi, A., Pirani, F., Pacifici, L., Rosi, M., **Noelia Faginas Lago (corresponding author)** (2024). A Computational Analysis of the DMSO-Water Interaction: Toward the Implementation of an Accurate Force Field. In: Gervasi, O., Murgante, B., Garau, C., Taniar, D., C. Rocha, A.M.A., Faginas Lago, M.N. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2024 Workshops. ICCSA 2024. Lecture Notes in Computer Science, vol 14823. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-65329-2$_2$4

110. Marzio Rosi, Nadia Balucani, Piergiorgio Casavecchia, Noelia Faginas-Lago, Luca Mancini, Dimitrios Skouteris and Gianmarco Vanuzzo ; A Computational Study of the Reaction Between N(2D) and Simple Aromatic Hydrocarbons. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2023 Workshops. ICCSA 2023. Lecture Notes in Computer Science, vol 14105. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-37108-0_46.

109. Noelia Faginas-Lago(corresponding author), Emília Valença Ferreira de Aragão, Luca Mancini, Marzio Rosi, Daniela Ascenzi and Fernando Pirani; Coding Cross Sections of an Electron Charge Transfer Process: Analysis of Different Cuts for the Entrance and Exit Potentials. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2023 Workshops. ICCSA 2023. Lecture Notes in Computer Science, vol 14111. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-37126-4_12.

108. Lombardi Andrea, Noelia Faginas-Lago and Leonardo Pacifici; Protein Tetrahedral Networks by Invariant Shape Coordinates. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2023 Workshops. ICCSA 2023. Lecture Notes in Computer Science, vol 14111. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-37126-4_9.

107. Pengxiao Liang, Emília Valença Ferreira de Aragão, Lisa Giani, Luca Mancini, Giacomo Pannacci, Demian Marchione, Gianmarco Vanuzzo, Noelia Faginas-Lago, Marzio Rosi, Dimitrios Skouteris, Piergiorgio Casavecchia, Nadia Balucani; OH(2) + C2H4 Reaction: A Combined Crossed Molecular Beam and Theoretical Study, J. Phys. Chem. A 2023, 127, 21, 4609–4623.

106. Jelle Vekeman, Inmaculada García Cuesta, Noelia Faginas-Lago, José Sánchez-Marín, Alfredo M. J. Sánchez de Merás; Development of accurate potentials for the physisorption of water on graphene, J. Chem. Phys. 158, 024104 (2023)https://doi.org/10.1063/5.0131626.

105. Pengxiao Liang, Emilia V. F. de Aragão, Giacomo Pannacci, Gianmarco Vanuzzo, Andrea Giustini, Demian Marchione, Pedro Recio, Francesco Ferlin, Domenico Stranges, Noelia Faginas Lago, Marzio Rosi, Piergiorgio Casavecchia, Nadia Balucani; Reactions O(3P, 1D) + HCCCN(X1+) (Cyanoacetylene): Crossed-Beam and Theoretical Studies and Implications for the Chemistry of Extraterrestrial Environments, J. Phys. Chem. A 2023, 127, 3, 685–703, https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c07708.

104. Apriliyanto, Y.B.; Faginas-Lago, N.(corresponding authors); Evangelisti, S.; Bartolomei, M.; Leininger, T.; Pirani, F.; Pacifici, L.; Lombardi, A.; Multilayer Graphtriyne Membranes for Separation and Storage of CO2: Molecular Dynamics Simulations of Post-Combustion Model Mixtures. Molecules 2022, 27, 5958. https://doi.org/10.3390/molecules27185958

103. de Aragão, E.V.F., Luca Mancini, Xiao He, Noelia Faginas-Lago, Marzio Rosi, Daniela Ascenzi, Fernando Pirani; Coding Cross Sections of an Electron Charge Transfer Process. In: Gervasi, O., Murgante, B., Misra, S., Rocha, A.M.A.C., Garau, C. (eds) Computa-tional Science and Its Applications – ICCSA 2022 Workshops. ICCSA 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13382. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-10592-0_24

102. Faginas-Lago, N. .(corresponding author), Lombardi, A., Apriliyanto, Y.B., Pacifici, L.; Confinement of CO2 Inside (20,0) Single-Walled Carbon Nanotubes, In: Gervasi, O., Murgante, B., Misra, S., Rocha, A.M.A.C., Garau, C. (eds) Computa-tional Science and Its Applications – ICCSA 2022 Workshops. ICCSA 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13382. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-10592-0_21

101. Andrea, L., Faginas-Lago, N., Pacifici, L. ; Protein Networks by Invariant Shape Coordinates and Deformation Indexes. In: Gervasi, O., Murgante, B., Misra, S., Rocha, A.M.A.C., Garau, C. (eds) Computa-tional Science and Its Applications – ICCSA 2022 Workshops. ICCSA 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13382. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-10592-0_26

100. Valença Ferreira de Aragão, E.; Mancini, L.; Faginas-Lago, N.(corresponding authors); Rosi, M.; Skouteris, D.; Pirani, F. Semiempirical Potential in Kinetics Calculations on the HC3N + CN Reaction. Molecules 2022, 27, 2297. https://doi.org/10.3390/molecules27072297

100. Vincent Richardson, Emília Valença Ferreira de Aragão, Xiao He, Fernando Pirani, Luca Mancini, Noelia Faginas-Lago, Marzio Rosi, Luca Matteo Martini and Daniela Ascenzi; Fragmentation of interstellar methanol by collisions with He˙+: an experimental and computational study Phys. Chem. Chem. Phys., 2022, 24, 22437-22452. DOI: 10.1039/D2CP02458F

17. Yusuf Bramastya Apriliyanto, Stefano Battaglia, Stefano Evangelisti, Noelia Faginas-Lago, Thierry Leininger, Andrea Lombardi; Toward a Generalized Hückel Rule: The Electronic Structure of Carbon Nanocones, J. Phys. Chem. A 2021, 125, 45, 9819–9825, https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c06402

18. Vekeman, J.; Bahamon, D.; García Cuesta, I.; Faginas-Lago, N.; Sánchez-Marín, J.; Sánchez de Merás, A.; Vega, L.F.; Grand Canonical Monte Carlo Simulations to Determine the Optimal Interlayer Dis-tance of a Graphene Slit-Shaped Pore for Adsorption of Methane, Hydrogen and their Equimolar Mixture. Nanomaterials 2021, 11, 2534. https://doi.org/10.3390/nano11102534

19. Andrea Lombardi and Noelia Faginas-Lago, Deactivation dynamics of carbon dioxide in gas phase at thermal and moderately high temperature regimes, Chemical Physics Letters, 779, 2021,https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.138850.

20. Faginas-Lago, N.(corresponding author), Apriliyanto, Y.B., Lombardi, A.; Intermolecular Forces for the Interaction of H2O–Graphtriyne Membrane: Contribu-tion of Induction Effects. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. IC-CSA 2021. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12958. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-87016-4_32

21. de Aragão, E.V.F., Mancini, L., Faginas-Lago, N., Rosi, M., Balucani, N., Pirani, F.; Long-Range Complex in the HC3N + CN Potential Energy Surface: Ab Initio Calculations and Intermolecular Potential. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. ICCSA 2021. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12958. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-87016-4_31

22. Perri, D., Simonetti, M., Lombardi, A., Faginas-Lago, N., Gervasi, O.; A New Method for Binary Classification of Proteins with Machine Learning. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. IC-CSA 2021. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12958. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-87016-4_29

23. Faginas-Lago, N.(corresponding author), Apriliyanto, Y.B. & Lombardi, A.; Confinement of CO2 inside carbon nanotubes. Eur. Phys. J. D 75, 161 (2021). https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-021-00176-7

24. Andrea, L., Faginas-Lago, N.; Classification of Biomolecules by Invariant Shape Coordinates and Deformation In-dexes. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2021. IC-CSA 2021. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12958. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-87016-4_27

25. de Aragão, E.V.F., Faginas-Lago, N., Apriliyanto, Y.B., Lombardi, A., Gas Adsorption on Graphtriyne Membrane: Impact of the Induction Interaction Term on the Computational Cost. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020. IC-CSA 2020. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12255. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-58820-5_38

26. Valença Ferreira de Aragão, E., Faginas-Lago, N., Rosi, M., Mancini, L., Balucani, N., Skouteris, D.; A Computational Study of the Reaction Cyanoacetylene and Cyano Radical Lead-ing to 2-Butynedinitrile and Hydrogen Radical. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020. IC-CSA 2020. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12251. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-58808-3$_51$

27. Perri, D., Simonetti, M., Lombardi, A., Faginas-Lago, N., Gervasi, O.; Binary Classification of Proteins by a Machine Learning Approach. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020. IC-CSA 2020. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12255. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-58820-5$_41$

28. Battaglia, S., Bouet, D., Lecoq, A., Evangelisti, S., Faginas-Lago, N.(corresponding author), Leininger, T., Lombardi, A.;. Distributed Gaussian orbitals for molecular calculations: application to simple sys-tems. Molecular Physics, 118(4) 2020. https://doi.org/10.1080/00268976.2019.1615646

29. Yusuf Bramastya Apriliyanto, Noviyan Darmawan, Noelia Faginas-Lago and Andrea Lombardi; Two-dimensional diamine-linked covalent organic frameworks for CO_2/N_2 capture and separation: theoretical modeling and simulations. Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 25918-25929. DOI: 10.1039/D0CP04258G

30. Andrea, L., Faginas-Lago, N.; Classification of Shapes and Deformations of Large Systems by Invariant Coordi-nates. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020. ICCSA 2020. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12255. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-58820-5$_40$

31. Faginas-Lago, N.(corresponding author), Apriliyanto, Y.B., Lombardi, A.; Carbon Capture and Separation from $CO_2/N_2/H_2O$ Gaseous Mixtures in Bilayer Graphtriyne: A Molecular Dynamics Study. In: Gervasi, O., et al. Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020. IC-CSA 2020. Lecture Notes in Computer Science(), vol 12255. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-58820-5$_36$

32. Stefano Battaglia, Stefano Evangelisti, Thierry Leininger, Fernando Pirani, Faginas-Lago N. (corresponding author); A novel intermolecular potential to describe the interaction between the azide anion and carbon nanotubes, Diamond and Related Materials, 101, 2020, 107533. https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.107533

33. Vekeman, Jelle; Sanchez-Marin, Jose; Sanchez de Meras, Alfredo; Garcia Cuesta, Inmaculada; Faginas Lago, Noelia (corresponding author) Flexibility in the Graphene Sheet: The Influence on Gas Adsorption from Molecular Dynamics Studies; J. Phys. Chem. C 2019, 123, 46, 28035–28047

34. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), Yusuf Bramastya Apriliyanto, Andrea Lombardi Molecular Simulations of CO2/N2/H2O Gaseous Mixture Separation in Graphtriyne Membrane In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2019. ICCSA 2019. Lecture Notes in Computer Science 11624, 1-14 (2019) DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-24311-1$_27$

35. M. Rosi, D. Skouteris, N. Balucani, C. Nappi, Noelia Faginas Lago, L. Pacifici, S. Fal-cinelli, D. Stranges An experimental and theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis Frontiers in Chemistry section Physical Chemistry and Chemical Physics 7, 326 (2019) DOI:10.3389/fchem.2019.00326

36. Cecilia Coletti, Federico Palazzetti, Roger W. Anderson, Vincenzo Aquilanti, Noelia Faginas-Lago , Andrea Lombardi Hypergeometric Polynomials, Hyperharmonic discrete abd continuous expansions: evaluations, interconnections, extensions In S. Misra et al. (Eds.): ICCSA 2019, LNCS 11624, pp. 460–476, 2019 https://doi.org/10.1007/978-3-030-24311-1$_41$

37. Marzio Rosi, Dimitrios Skouteris, Nadia Balucani, Luca Mancini, Noelia Faginas Lago, Linda Podio, Claudio Codella, Bertrand Lefloch, Cecilia Ceccarelli Electronic Structure and Kinetics 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, 306-315 (2019) https://doi.org/10.1007/978-3-030-24302-9$_22$

38. Andrea Lombardi, Noelia Faginas-Lago, Vincenzo Aquilanti The Invariance Approach to Structure and Dynamics: Classical Hyperspherical Co-ordinates In: Misra S. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2019. ICCSA 2019. Lecture Notes in Computer Science, vol 11621, 306-315 (2019) https://doi.org/10.1007/978-3-030-24311-1_31 IF della rivista (Journal of Ci-tation Reports, 2018) =3.782; Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 Google-Scholar (Data di pubblicazione: 29 giugno 2019); SJR=0.28

39. S. Battaglia, Noelia Faginas Lago (corresponding author), Thierry Leinin-ger, Stefano Evangelisti Tuning the magnetic properties of beryllium chains Physical Chemistry Chemical Physics, 21, 6080 - 6086 (2019) DOI: 10.1039/c8cp07159d IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.567; Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 9 GoogleScholar; SJR=1.31

40. Dimitrios Skouteris, Nadia Balucani, Cecilia Ceccarelli, Noelia Faginas Lago, Clau-dio Codella, Stefano Falcinelli, Marzio Rosi Interstellar dimethyl ether gas-phase formation: a quantum chemistry and kinetics study Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 482 (3) 3567- 3575 (2019) DOI: 10.1093/mnras/sty2903 (2018) IF della rivista (Journal of Citation Re-ports, 2018) =5.231 Numero di citazioni: 3 ISI-WoS; 4 Scopus; 6 GoogleScholar; SJR=2.42

41. J. Vekeman, Noelia Faginas Lago (corresponding author), A. Lombardi, A. Sánchez de Merás, I. García Cuesta, M. Rosi Molecular dynamics of CH4/N2 mixtures on a flexible graphene layer: adsorption and selectivity case study Frontiers in Chemistry, section Physical Chemistry and Chemical Physics 7, 386 (2019) DOI: 10.3389/fchem.2019.00386 (IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.782 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=1.02 (Data di pubblicazione: 03 giugno 2019))

42. J. Vekeman, I. G. Cuesta, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), J. Wilson, J. Sánchez-Marín, A.Sánchez de Merás Potential models for the simulation of methane adsorption on graphene: development and CCSD(T) benchmarks; Physical Chemistry Chemical Physics 20, 25518 (2018) DOI: 10.1039/C8CP03652G IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.567 Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 3 Scopus; 2 GoogleScholar; SJR=1.31

43. Marzio Rosi, Luca Mancini, Dimitrios Skouteris, Cecilia Ceccarelli, Noelia Faginas Lago, Linda Podio, Claudio Codella, Bertrand Lefloch, Nadia 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 695, 87-93 (2018) https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.01.053. IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.901 Numero di citazioni: 6 ISI-WoS; 8 Scopus; 8 GoogleScholar; SJR=0.58

44. S. Battaglia, Hai-Anh Le, Gian Luigi Bendazzoli, Noelia Faginas Lago, Thierry Leininger, Stefano Evangelisti A theoretical study on cyclacenes: Analytical tight[U+2010]binding approach International Journal of Quantum Chemistry 118, e25569 (2018) DOI:https://doi.org/10.1002/qua.25569. IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.263 Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.85

45. J. Wilson, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), J. Vekeman, I. G. Cuesta, J. Sánchez-Marín, A. Sánchez de Merás Modeling the Interaction of Carbon Monoxide with Flexible Graphene: From Coupled Cluster Calculations to Molecular[U+2010]Dynamics Simulations, ChemPhysChem 19, 19, 774 (2018) https://onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/cphc.201701387. IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.077 Numero di citazioni: 9 ISI-WoS; 9 Scopus; 9 GoogleScholar; SJR=1.08

46. Yusuf Bramastya Apriliyanto, Noelia Faginas Lago (corresponding author), Andrea Lombardi, Stefano Evangelisti, Massimiliano Bartolomei, Thierry Leininger, and Fernando Pirani Nanostructure Selectivity for Molecular Adsorption and Separation: the Case of Graphyne Layers Journal of Physical Chemistry C 2018 DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b04960. IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.923 Numero di citazioni: 6 ISI-WoS; 8 Scopus; 8 GoogleScholar; SJR=1.65

47. Vekeman J., Noelia Faginas-Lago (corresponding author), Cuesta I.G., Sánchez-Marín J., De Merás A.S. Nitrogen Gas on Graphene: Pairwise Interaction Potentials. Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2018.ICCSA 2018.Lecture Notes in Computer Science, vol 10964 pp 563-578. Springer, DOI:https://doi.org/10.1007/978-3-319-95174-4_4 . Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 2 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28

48. Barreto P.R.P. , Alessandra F. Albernaz, Vincenzo Aquilanti, Noelia Faginas-Lago, Gaia Gross, Andrea Lombardi, Federico Palazzetti, Fernando Pirani Potential Energy Surface for the Interaction of Helium with the Chiral Molecule Propylene Oxide. In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2018. ICCSA 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol 10964. Springer, DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-95174-4_46 . Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 2 Scopus; 2 GoogleScholar; SJR=0.28

49. Battaglia S., Evangelisti S., Leininger T., Faginas-Lago Noelia (corresponding author) Confinement of the Pentanitrogen Cation Inside Carbon Nanotubes. In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2018. ICCSA 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol 10964 pp 579-592. Springer, (https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-95174-4_45) Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28

50. Skouteris D., Marzio Rosi, Nadia Balucani, Luca Mancini, Noelia Faginas Lago, Linda Podio, Claudio Codella, Bertrand Lefloch, Cecilia Ceccarelli A Theoretical Investigation of the Reaction H+SiS2 and Implications for the Chemistry of Silicon in the Interstellar Medium. Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2018. ICCSA 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol 10961. Springer, DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-95165-2_50 IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.077 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28

51. S. Battaglia, Noelia Faginas-Lago, S. Evangelisti, T. Leininger N3- Azide Anion Confined Inside Finite-Size Carbon Nanotubes Journal of Molecular Modeling (2017) 23:294 https://doi.org/10.1007/s00894-017-3468-8 IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.335 Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 2 Scopus; 2 GoogleScholar; SJR=0.37

52. L. Podio, C. Codella, B. Lefloch, N. Balucani, C. Ceccarelli, R. Bachiller, M. Benedettini, J. Cernicharo, Noelia Faginas-Lago, F. Fontani, A. Gusdorf, M. Rosi Silicon-bearing molecules in the shock L1157-B1: first detection of SiS around a Sun-like protostar Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters, 470 (1), L16–L20 (2017) DOI:10.1093/mnrasl/slx068 IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =5.231 Numero di citazioni: 10 ISI-WoS; 11 Scopus; 14 GoogleScholar; SJR=2.65

53. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), Albertí M., Lombardi A., Palazzetti F. Acetone-Water Mixtures: Molecular Dynamics Using a Semiempirical Intermolecular Potential. In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2017. ICCSA 2017. Lecture Notes in Computer Science, vol 10406. Springer, Cham DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-62398-6_1 IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28

54.Stefano Battaglia, Noelia Faginas-Lago, Dirk Andrae, Stefano Evangelisti, and Thierry Leininger Increasing Radical Character of Large [n]cyclacenes Unveiled by Wave Function Theory Journal of Physical Chemistry A 121 (19), 3746-3756 DOI: 10.1021/acs.jpca.7b00123 (2017) IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.641 Numero di citazioni: 12 ISI-WoS; 12 Scopus; 15 GoogleScholar; SJR=0.97

55.Noelia Faginas-Lago (corresponding author), Yeamin, M.B., Sánchez-Marín, J. et al. Modelization of the H2 adsorption on graphene and molecular dynamics simulation Theoretical Chemistry Accounts 136: 91. https://doi.org/10.1007/s00214-017-2110-2 (2017) IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.598 Numero di citazioni: 4 ISI-WoS; 4 Scopus; 4 GoogleScholar; SJR=0.97

56.Antonio Laganà, Noelia Faginas Lago, Osvaldo Gervasi, Sergio Tasso, ELCHEM expression of interest for the EGI, EUDAT and INDIGO-datacloud H2020 project proposal EINFRA12 (A) VIRT&L-COMM10.2016.7, 2016 ISSN: 2279-8773, http://services.chm.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/15252

57.Margarita Albertí, Noelia Faginas Lago, Antonio Laganà The selective role of multipolar interaction in the formation of CH4 and CO2 clathrate hydrates VIRT&L-COMM10.2016.2, 2016 ISSN: 2279-8773, http://services.chm.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/149

58.Noelia Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi Aqueous N-methylacetamide: New analytic potentials and a molecular dynamics study Journal of Molecular liquids 224,792-800, DOI:10.1016/j.molliq.2016.10.077 (2016). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =4.561 Numero di citazioni: 4 ISI-WoS; 5 Scopus; 5 GoogleScholar; SJR=0.86

59.Noelia Faginas-Lago (corresponding author), D. Yeni, F. Huarte-Larrañaga, Y. Wang, M. Alcamí, F. Martín Adsorption of Hydrogen Molecules on Carbon Nanotubes Using Quantum Chemistry and Molecular Dynamics Journal of Physical Chemistry A 120 (32), 6451-6458 DOI: 10.1021/acs.jpca.5b12574 (2016). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.641 Numero di citazioni: 18 ISI-WoS; 21 Scopus; 22 GoogleScholar; SJR=0.97

60.M. Rosi, S. Falcinelli, N. Balucani, Noelia Faginas Lago, C. Ceccarelli, D. Skouteris A Theoretical study on the relevance of protonated and ionized species of methanimine and methanol in astro-chemistry Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular and Materials Sciences and Technologies) ICCSA 2016, Part I, LNCS 9786, 296-308 DOI: 10.1007/978-3-319-42085-1_23 (2016). Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28

61. L. Pacifici, F. Talotta, N. Balucani, Noelia Faginas-Lago, A. Laganà Modeling Combustions: The Ab Initio Treatment of the O(P) + CH OH Reaction Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) ICCSA 2016, Part I, LNCS 9786, 71-83 DOI: 10.1007/978-3-319-42085-1_6 (2016). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.28

62. S. Falcinelli, M. Rosi, Noelia Faginas Lago, F. Vecchiocattivi A Theoretical and Computational Approach to a Semi-classical Model for Electron Spectroscopy Calculations in Collisional Autoionization Processes Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies)ICCSA 2016, Part I, LNCS 9786, 258-272 DOI: 10.1007/978-3-319-42085-1_20 (2016). Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 2 Scopus; 3 GoogleScholar; SJR=0.28

63.Noelia Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi Acetone clusters molecular dynamics using a semi-empirical intermolecular potential Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) ICCSA 2016, Part I, LNCS 9786, 129–140 DOI: 10.1007/978-3-319-42085-1_10 (2016). Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 2 Scopus; 2 GoogleScholar; SJR=0.28

64.Noelia Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi, F. Pirani A force field for acetone: the transition from small clusters to liquid phase investigated by Molecular Dynamics simulations Theoretical Chemical Accounts 135(7), 1-9 DOI:10.1007/s00214-016-1914-9 (2016). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.598 Numero di citazioni: 11 ISI-WoS; 8 Scopus; 12 GoogleScholar; SJR=0.46

65.A. Lombardi, Noelia Faginas-Lago, G. Grossi, F. Palazzetti, V. Aquilanti Collisional energy exchange in CO2–N2 gaseous mixtures Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) ICCSA 2016, Part I, LNCS 9786, 246-257 DOI: 10.1007/978-3-319-42085-1_19 (2016).Numero di citazioni: 5 ISI-WoS; 5 Scopus; 6 GoogleScholar; SJR=0.28N.

66. N.Faginas Lago Lecture - Management of self evaluation sessions for ATS and NTC. VIRT&L-COMM, [S.l.], jan. 2016. ISSN 2279-8773. http://www.hpc.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/102/99

67.Noelia Faginas-Lago, O. Gervasi, S. Tasso Tools for e-Learning and e-Assessment: Glorep and EOL. VIRT&L-COMM, [S.l.], jan. 2016. ISSN 2279-8773.http://www.hpc.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/101>.

68.L. Pacifici, M. Rosi, Noelia Faginas-Lago, D. Stranges, S. Falcinelli, N. Balucani A theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) Part II, LNCS 9156, 384-393 DOI: 10.1007/978-3-319-21407-8_28 (2015). Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28

69.N. Faginas-Lago (corresponding author), M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi Ion-water cluster molecular dynamics using a semiempirical intermolecular potential Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 9156, (II) 355-370 DOI: 10.1007/978-3-319-21407-8_26 (2015). Numero di citazioni: 7 ISI-WoS; 6 Scopus; 6 GoogleScholar; SJR=0.28

70.A. Lombardi, Noelia Faginas-Lago, L. Pacifici, G. Grossi Energy transfer upon collision of selectively excited CO2 molecules: State-to-state cross sections and probabilities for modeling of atmospheres and gaseous flows The Journal of Chemical Physics 143, 034307 DOI: 10.1063/1.4926880 (2015). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.997 Numero di citazioni: 22 ISI-WoS; 24 Scopus; 25 GoogleScholar; SJR=1.16

71. N. Faginas-Lago (corresponding author), A. Lombardi, M. Albertí, G. Grossi Accurate analytic intermolecular potential for the simulation of Na+ and K+ ion hydration in liquid water Journal of Molecular Liquids 204, 192-197 DOI: 10.1016/j.molliq.2015.01.029 (2015). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =4.561 Numero di citazioni: 18 ISI-WoS; 21 Scopus; 22 GoogleScholar; SJR=0.86

72. D. Skouteris, N. Balucani, Noelia Faginas-Lago, S. Falcinelli, M. Rosi Dimerization of methanimine and its charged species in the atmosphere of Titan and interstellar/cometary ice analogs Astronomy & Astrophysics 584, A76 DOI: 10.1051/0004-6361/201526978 (2015). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =6.209 Numero di citazioni: 15 ISI-WoS; 20 Scopus; 14 GoogleScholar; SJR=2.53

73. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), M. Albertì, A. Costantini, A Laganà, A. Lombardi, L. Pacifici An innovative synergistic Grid approach to the computational study of protein aggregation mechanisms Journal of Molecular Modeling 20(7), 2226-2235 DOI: 10.1007/s00894-014-2226-4 (2014) IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.335 Numero di citazioni: 17 ISI-WoS; 20 Scopus; 21 GoogleScholar; SJR=0.37

74. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi, L. Pacifici, A. Costantini The molecular stirrer catalytic effect in methane ice formation Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 8579, (I) 585-600 DOI: 10.1007/978-3-319-09144-0_40(2014). Numero di citazioni: 10 ISI-WoS; 10 Scopus; 11 GoogleScholar; SJR=0.28

75. A.Lombardi, Noelia Faginas-Lago, A. Laganà Grid Calculation Tools for Massive Applications of Collision Dynamics Simulations: Carbon Dioxide Energy Transfer Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 8579, (I) 627-639 DOI: 10.1007/978-3-319-09144-0_43 (2014).Numero di citazioni: 4 ISI-WoS; 5 Scopus; 5 GoogleScholar; SJR=0.28

76. Bin Yeamin, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), M. Albertí, I. G. Cuesta, J. Sánchez-Marín, A. M. J. Sánchez de Merás Multi-scale Theoretical Investigation of Molecular Hydrogen Adsorpion over Graphene: Coronene As a Case Study RSC Advances 4, 54447–54453 DOI: 10.1039/C4RA08487J (2014). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.049 Numero di citazioni: 19 ISI-WoS; 22 Scopus; 22 GoogleScholar; SJR=0.81

77.Lombardi, A. Laganà, F. Pirani, F. Palazzetti, Noelia Faginas -Lago Carbon oxides in gas flows and earth and planetary atmospheres: State-to-state simulations of energy transfer and dissociation reactions Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7972, 17-31 DOI: 10.1007/978-3-642-39643-4_2 (2013) Numero di citazioni: 17 ISI-WoS; 15 Scopus; 20 GoogleScholar; SJR=0.28

78.S. Falcinelli, M. Rosi, P. Candori, F. Vecchiocattivi, A. Bartocci, A. Lombardi, Noelia Faginas Lago, F. Pirani Modeling the intermolecular interactions and characterization of the dynamics of collisional autoionization processes Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7971, 69-83 DOI: 10.1007/978-3-642-39637-3_6 (2013) Numero di citazioni: 27 ISI-WoS; 29 Scopus; 28 GoogleScholar; SJR=0.28

79. Noelia Faginas Lago (corresponding author), A. Lombardi, L. Pacifici, A. Costantini Design and implementation of a Grid application for direct calculations of reactive rates Computational and Theoretical Chemistry 1022, 103-107 DOI: 10.1016/j.comptc.2013.08.014. IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.344 Numero di citazioni: 6 ISI-WoS; 8 Scopus; 8 GoogleScholar; SJR=0.42

80. M. Albertí, Noelia Faginas Lago Competitive solvation in the K+ -(C6H6)n-(H2O)m (n = 1–4; m = 1–6) aggregates European Physical Journal D (Atomic, Molecular, Optical & Plasma Physics) 1, 67-73 DOI:110.1140/epjd/e2013-30753-x (2013). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.331 Numero di citazioni: 17 ISI-WoS; 20 Scopus; 41 GoogleScholar; SJR=0.42

81.Noelia Faginas -Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi Water (H2O)m or benzene (C6H6)n aggregates to solvate the K+? Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7971, 1-15 DOI: 10.1007/978-3-642-39637-3_1(2013). Numero di citazioni: 19 ISI-WoS; 16 Scopus; 19 GoogleScholar; SJR=0.28

82.L. Pacifici, M. Verdicchio, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), A. Lombardi, A. Costantini A High-Level Ab Initio Study of the N2+N2 Reaction Channel Journal of Computational Chemistry 34, 2668–2676 DOI:10.1002/jcc.23415 (2013) IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.194 Numero di citazioni: 17 ISI-WoS; 21 Scopus; 26 GoogleScholar; SRJ=1.11

83.A. Lombardi, Noelia Faginas-Lago, L. Pacifici, A. Costantini Modeling of Energy Transfer From Vibrationally Excited CO2 Molecules: Cross Sections and Probabilities for Kinetic Modeling of Atmospheres, Flows, and Plasmas Journal of Physical Chemistry A 117, 11430-11440 DOI:10.1021/jp408522m (2013). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.641 Numero di citazioni: 24 ISI-WoS; 27 Scopus; 33 GoogleScholar; SJR=0.97

84.M. Albertí, Noelia Faginas Lago (corresponding author), F. Pirani Benzene water interaction: From gaseous dimers to solvated aggregates Chemical Physics 399, 232-239 DOI: 10.1016/j.chemphys.2011.08.009 (2012). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.822 Numero di citazioni: 33 ISI-WoS; 33 Scopus; 39 GoogleScholar; SJR=1.31

85.S. Rampino, Noelia Faginas Lago, A. Laganà, F. Huarte-Larrañaga An Extension of the Grid Empowered Molecular Simulator to Quantum Reactive Scattering Journal of Computational Chemistry 2012, 33, 708–714 DOI:10.1002/jcc.22878 (2012). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.194 Numero di citazioni: 11 ISI-WoS; 16 Scopus; 18 GoogleScholar; SRJ=1.11

86.M. Albertí, Noelia Faginas Lago Ion Size Influence on the Ar Solvation Shells of M+ -C6F6 Clusters (M+ = Na, K, Rb, Cs) Journal of Physical Chemistry A 116, 3094-3102 DOI:10.1021/jp300156k (2012). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.641 Numero di citazioni: 17 ISI-WoS; 21 Scopus; 25 GoogleScholar; SJR=0.97

87. A. Lombardi , Noelia Faginas -Lago (corresponding author), A. Laganà, F. Pirani, S. Falcinelli A bond-bond portable approach to intermolecular interactions: simulations for N-methylacetamide and carbon dioxide dimers Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 7333, 387- 400 DOI: 10.1007/978-3-642-31125-3_30 (2012). Numero di citazioni: 29 ISI-WoS; 29 Scopus; 28 GoogleScholar; SJR=0.28

88.M. Albertí, Noelia Faginas Lago, F. Pirani Ar Solvation Shells in K+-HFBz: From Cluster Rearrangement to Solvation Dynamics Journal of Physical Chemistry A 115, 10871–10879 DOI:10.1021/jp206601m (2011).IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.641 Numero di citazioni: 15 ISI-WoS; 17 Scopus; 19 GoogleScholar; SJR=0.97

89. Noelia Faginas Lago, M. Alberti, A. Laganà, F. Pirani A portable intermolecular potential for molecular dynamics studies of NMA-NMA and NMA-H2O aggregates Physical Chemistry Chemical Physics 13, 8422–8432 DOI:10.1039/c0cp01763a (2011). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.567 Numero di citazioni: 30 ISI-WoS; 31 Scopus; 38 GoogleScholar; SJR=1.31

90.Noelia Faginas Lago, F. Huarte-Larrañaga Quantum and semiclassical approaches to evaluate rate coefficients: Implementation of final state projections Science and Supercomputing in Europe, Research Highlights S. Monfardini-CINECA (Eds). 10 (2011). ISBN: 978-88-86037-25-9

91. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), A. Costantini, F. Huarte-Larrañaga Direct calculation of rate coefficients on the grid: exact quantum versus semiclassical results for N+N2 International Journal of Quantum Chemistry 110, 422-431 DOI:10.1002/qua.22273 (2010). Numero di citazioni: 4 ISI-WoS; 6 Scopus; 6 GoogleScholar; SJR=0.85

92.S. Pallottelli, S. Tasso, N. Pannnacci, A. Costantini, Noelia Faginas-Lago Distributed and collaborative Learning objects repositories on grid networks Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 6019, 29–40 DOI: 10.1007/978-3-642-12189-0-3 (2010). Numero di citazioni: 15 ISI-WoS; 15 Scopus; 20 GoogleScholar; SJR=0.28

93.A. Laganà, A. Costantini, O. Gervasi, Noelia Faginas Lago, C. Manuali, S. Rampino, COMPCHEM: Progress Towards GEMS a Grid Empowered Molecular Simulator and Beyond Journal of Grid Computing 8, 571–586 DOI:10.1007/s10723-010-9164-x (2010). F della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.288 Numero di citazioni: 53 ISI-WoS; 55 Scopus; 74 GoogleScholar; SJR=0.69

94.Costantini, Noelia Faginas-Lago, A. Laganà and F. Huarte-Larrañaga A Grid Implementation of Direct Quantum Calculations of Rate Coe[U+FB03]cients Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 5593, 104–114 DOI: 10.1007/978-3-642-02457-3_9 (2009). Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 2 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28

95.Noelia Faginas Lago, F. Huarte-Larrañaga, M. Alberti On the suitability of the ILJ potential to match different formulations of the electrostatic potential for liquid water simulations The European Physical Journal D (Atomic, Molecular, Optical & Plasma Physics) 55, 75–85 DOI:10.1140/epjd/e2009-00215-5 (2009). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.331 Numero di citazioni: 53 ISI-WoS; 57 Scopus; 63 GoogleScholar; SJR=0.42

96.Laganà, C. Manuali, Noelia Faginas Lago, O. Gervasi, S. Crocchianti, A. Riganelli, S. Shanze From Computer Assisted to Grid Empowered Teaching and Learning Activities in Higher Level Chemistry Education Innovative Methods in Teaching and Learning Chemistry in Higher Education, I. Eilks and B. Byers (Eds). 153-190 (2009). ISBN: 978-1-84755-958-6. Numero di citazioni: 20 GoogleScholar

98.A. Costantini, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), A. Laganà and F. Huarte-Larrañaga A Grid Implementation of Direct Semiclassical Calculations of Rate Coe[U+FB03]cients Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 5593, 93–103 DOI: 10.1007/978-3-642-02457-3_8(2009). Numero di citazioni: 3 ISI-WoS; 2 Scopus; 3 GoogleScholar; SJR=0.28

99.Noelia Faginas Lago, A. Laganà, F. Huarte-Larrañaga Full dimensional quantum versus semiclassical reactivity for the bent transition state reaction N + N2 Chemical Physics Letters 464, 249–255 DOI:10.1016/j.cplett.2008.09.008 (2008). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.901 Numero di citazioni: 13 ISI-WoS; 16 Scopus; 17 GoogleScholar; SJR=0.58

100.A. Laganà, Noelia Faginas Lago, S. Rampino, F. Huarte-Larrañaga, E. García Thermal rate coefficients in collinear versus bent transition state reactions: the N+ N2 case study Physica Scripta 78, 058116 DOI:10.1088/0031-8949/78/05/058116 (2008). F della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.151 Numero di citazioni: 12 ISI-WoS; 15 Scopus; 17 GoogleScholar; SJR=0.53

101.Noelia Faginas Lago Implementation of a Semiclassical Initial Value representation Code on the Grid to Calculate Rate Coefficients of Atom diatom reaction Chemistry and Material Science Applications on Grid Infrastructures, S. Cozzini and A. Laganà (Eds). 207-216 (2008). ISBN: 92-95003-42-X

102.Noelia Faginas Lago (corresponding author), A. Laganà, M. Paolantoni, M. Alberti Structural order in water: comparison between the spectral analysis of Raman data and molecular dynamics results American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings 963, (2 A) 651-654 DOI: 10.1063/1.2836168 (2007). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SRJ=0.18

103.Noelia Faginas Lago, Fermin Huarte Larrañaga Quantum vs semiclassical dynamics approaches from highly symmetric to asymmetric reactions" Conference proceedings of the selected papers of the Fifth International Conference on "Computational science and its applications" 1, 441-443 (2007). Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar

104.F. Filomia, N. Faginas Lago (corresponding author) A Simplified Myoglobin Model for Molecular Dynamics Calculations Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 3980, 731-737 DOI: 10.1007/11751540_77 (2006). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.28

105.Noelia Faginas-Lago, A. Laganà A semiclassical initial value representation approach to N+N2 rate coefficient Recent Progress in Computational Sciences and Engineering 7A-B, 297-300 DOI: 10.1201/9780429070655-73 (2006). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.23

106.Noelia Faginas Lago, A. Laganà Thermal rate coefficients for the N + N2 reaction: quantum and semiclassical calculations Semiclassical and Other Methods for Understanding Molecular Collisions and Chemical Reactions, S. Sen, D. Sokolovski and J. N. L. Connor (Eds) . 150-153 (2006). ISBN: 0-9545289-3-X

107.Noelia Faginas Lago, A. Laganà, R. Gargano and R. P. R. Barreto On the semiclassical initial value calculation of the thermal rate coefficients for the N + N2 reaction The Journal of Chemical Physics 125, 114311-6 DOI:10.1063/1.2345363 (2006). Numero di citazioni: 8 ISI-WoS; 17 Scopus; 18 GoogleScholar; SJR=1.16

108. Noelia Faginas Lago, A. Laganà A comparison of semiclassical IVR and exact quantum collinear atom diatom transition probabilities for mixed reactive and non reactive regimes American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings 762, 920-925 DOI:10.1063/1.1941652 (2005). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 5 Scopus; 5 GoogleScholar; SRJ=0.18

109.Noelia Faginas Lago, A. Laganà, E. García and X. Guimenez Thermal rate coefficients for the N + N2 reaction: Quasiclassical, Semiclassical and Quantum calculations Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 3480, 1083-1092 DOI:10.1007/11424758_113 (2005). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =0.513 Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 3 Scopus; 4 GoogleScholar; SJR=0.28

110.Noelia Faginas Lago, A. Laganà, A. Riganelli Quantum vs Semiclassical initial value representation probabilities for non reactive systems International Journal of Quantum Chemistry 96, 547-553 DOI:10.1002/qua.10748 (2004). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.263 Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 3 Scopus; 2 GoogleScholar; SJR=0.85

111.Noelia Faginas Lago, A. Laganà Foreword Future Generation Computer Systems 20, 701-702 DOI:0.1016/j.future.2003.11.014 (2004). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =0.528 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.84

112.Noelia Faginas-Lago, A. Laganà Initial value Semiclassical approaches to reactive and non reactive transition probabilities Lecture Notes in Computer Science (Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies) 2658, 357-365 DOI:10.1007/3-540-44862-4_39 (2003). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =0.528 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.28

113.A. Laganà, S. Crocchianti, Noelia Faginas-Lago, L. Pacifici and G. Ferraro A non orthogonal coordinate approach to atom diatom parallel reactive scattering calculations Collection of Czechoslovak Chemical Communications 68, 307-330 DOI:10.1135/cccc20030307 (2003). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.041 Numero di citazioni: 11 ISI-WoS; 15 Scopus; 22 GoogleScholar

114.A. Riganelli, Noelia Faginas Lago Foreword Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering 2, 310 (2002). F della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =0.528 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SRJ=0.23

SEMINARI TENUTI SU INVITO PRESSO ISTITUZIONI ESTERE

6.

5. maggio 2018, Departamento de Química, Universidad de la Rioja, Logroño, (Spagna) organizzato dalla Real Sociedad Española de Química. “Carbon dioxide and Nitrogen separation by Multilayer Graphtriyne Membranes: A molecular dynamics study”

4. maggio 2017, Departamento de Química, Universidad de la Rioja, Logroño, (Spagna) organizzato dalla Real Sociedad Española de Química. “CO Adsorption on graphene: A theoretical approach”

3. Settembre 2015, Core course ITN-EJD: TCCM.642294 “Success story: Master-up spin-off of the University of Perugia”, 28 settembre-30 settembre 2015, Madrid (Spagna).

2. Giugno 2014, Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia, Spagna. “Introduction to Molecular Dynamics”.

1. Ottobre 2009, Departament de Quimica Fisica, Universitat di Barcelona, (Spagna). “EGEEIII - Enabling Grids for E-Science”.

CONGRESSI

Invited talks

6.

5. 12th Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA-2020) che avrà luogo in Vigo, 23-25 giugno 2020

4. 2nd International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry “Molecular Simulations of CO2/N2/H2O Gaseous Mixture Separation in Graphtriyne Membrane” in Vigo, 6-7 giugno 2019

3. 6th EuCheMS Chemistry Congress, Siviglia (Spagna) 11-15 Settembre 2016. “Innovative tools of teaching and learning Chemistry: EChemtest, EoL and Glorep”

2. Complex Organic Molecules in space: Gas-Phase Routes and Isotopic Enrichment, Pisa (Italia), 7-8 Marzo 2016. “A theoretical study of dimerization of methanimine and its charged species: implications for the aerosols presence in the upper atmosphere of Titan”

1. International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC), Madrid (Spagna), 29 giugno-2 luglio 2010. “Implementation of the AMPF potential to study the NMA-NMA and NMA-H2O interactions”

Contributi orali (41?..... Comunicazioni orali a congressi nazionali e internazionali personalmente presentati)

ICCSA 2019 - Workshop on Theoretical and Computational Chemistry and its Applications, University of San Pietroburgo (Russia) 01-04 luglio 2019. Noelia Faginas-Lago, Yusuf Bramastya Apriliyanto, Andrea Lombardi, Molecular Simulations of CO2/N2/H2O Gaseous Mixture Separation in Graphtriyne Membrane.

ICCSA 2019 - Workshop on Theoretical and Computational Chemistry and its Applications, University of San Pietroburgo (Russia) 01-04 luglio 2019. Andrea Lombardi, Noelia Faginas-Lago, Vincenzo Aquilanti, The invariance approach to structure and dynamics: classical hyperspherical coordinates

Kinetics days: Observatory for astrochemical kinetics and related aspects, Scuderie vecchie di villa Torlonia, Roma (Italia) 27-28 giugno 2019, Interestellar dimethyl ether gas phase formation: a quantum chemistry and kinetics study

ICCSA 2017 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Tech-nologies, University of Trieste (Italia) 3-6 luglio 2017, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi, F. Palazzetti, Acetone-water mixtures: Molecular Dynamics using a semiem-pirical intermolecular potential.

European Graphene Forum 2017, Smart Materials and Surfaces - SMS EUROPE 2017, Parigi (France) 26-28 aprile 2017, J. Wilson, N. Faginas-Lago, J. Vekeman, I.G. Cuesta, J. Sánchez-Marín and A. Sánchez de Merás, CO adsorption on graphene: A theoretical approach.

IV Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Scuola Normale Superiore, Pisa (Italia) 03-05 ottobre 2016, J. Wilson, N. Faginas-Lago, A. Sánchez de Merás, Gas Adsorption Graphene: Molecular Dynamics simulations and first principles

ICCSA 2016 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Tech-nologies, Beijing (China) 04 luglio -07 luglio 2016, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lom-bardi, Acetone clusters molecular dynamics using a semiempirical intermolecular potential

EUCOCC10, 10th European Conference on Computational Chemistry, Fulda (Germania), 31 agosto- 3 settembre 2015, N. Faginas-Lago, Multilayer Hydrogen Adsorption on Gra-phene from Multi- scale Simulation Modelling

ICCSA 2015 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, Banff (Canada) 22 giugno-25 giugno 2015, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi, Ion-water cluster molecular dynamics using a semiempirical in-termolecular potential

ICCSA 2015 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, Banff (Canada) 22 giugno-25 giugno 2015, A theoretical investigation of 1-butanol unimolecular decomposition.

ICCSA 2014 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, Guimãres (Portogallo) 30 giugno-04 luglio 2014, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi, L. Pacifici, A. Costantini, The molecular stirrer catalytic effect in methane ice formation.

EC2E2N2: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference 2014 " Lifelong Learning", Madrid, (Spagna) 24-26 aprile, 2014, N. Faginas-Lago, W03-Sustainable Entrepreneurship

ICCSA 2013 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, Ho-Chi Minh City (Vietnam) 24 -27 giugno 2013, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi, A. Laganà, Water (H2O) m or benzene (C6H6) n aggregates to solvate the K +?

VCC 2013 - 1st Virtual Conference on Computational Chemistry, 1-31 agosto 2013, N. Faginas Lago, A. Lombardi and M. Albertí, Empirical Intermolecular Potential in N-Methylacetamide-Water Disolution: Molecular Dynamics Simulations

ICCSA 2012 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, Salvador de Bahia (Brasil) 17 -21 giugno 2012, N. Faginas-Lago, A. Lombardi, A. Laganà, F. Pirani, S. Falcinelli, A bond-bond portable approach to intermolecular interactions: in from gas condensed phase to simulations for N-methyalcetamide and carbon dioxide dimers

Theory, Experiments and Modelling of Chemical Processes, Dynamics and molecular in-teractions, Bologna, (Italia) 29 novembre 2012, N. Faginas-Lago, A. Laganà, A molecu-lar dynamics study of hydrogen adsorption in carbon nanotubes

EC2E2N2: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference, Uthrecht, (Paesi Bassi), 4-6 aprile 2013, N. Faginas-Lago,W03-Sustainable Entrepreneurship

EC2E2N2: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference 2012 " Lifelong Learning", Milano (Italia), 25-28 aprile 2012, N. Faginas-Lago, University Master Levels- Computational Chemistry 4

XXIV Congresso Nazionale della Societa Chimica Italiana, Lecce (Italia) 11-16 settembre 2011, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, NMA in aqueous solution using a portable intermolecular potential

EC2E2N2: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference 2011 " Lifelong Learning", Bratislava (Slovacchia), 19- 22 maggio 2011, N. Faginas-Lago, University Master Levels- Computational Chemistry 4

XXX Convegno Interregionale delle Sezione Toscana Umbria Marche Abruzzo della So-cieta Chimica Italiana TUMA, Perugia (Italia) 30 giugno – 1 luglio 2011, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, Similarities between the K- C6F6 and the K+-C6F6 aggregates

1st Phys4Entry Review: Molecular Dynamics on Earth Atmosphere, Barcelona (Spagna), 2-3 giugno 2011, N. Faginas-Lago, QCT calculations for CO2-CO2

EC2E2N2: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference 2010, Montpellier (Francia), 15-17 aprile 2010, N. Faginas-Lago, University Master Levels- Computational Chemistry 4

EC2E2N2: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference 2009, Poznan (Polonia), 15-18 aprile 2009, N. Faginas-Lago, Implementation of the new questions inside the Computational Chemistry 4 database

EUCOCC7, 7th European Conference on Computational Chemistry, Isola di San Servolo, Venezia (Italia), 11-15 settembre 2008, N. Faginas-Lago, Full dimensional quantum versus semiclassical reactivity for the bent transition state reaction N + N2

EC2E2N2: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference 2008, Helsinki (Finlandia), 14-17 maggio 2008, N. Faginas-Lago, Implemen-tation of the new questions inside the Computational Chemistry 4 database inside EChemTest® Group Leaders' Meeting

International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2006), Corfú (Grecia), 25-20 settembre 2007, N. Faginas-lago, A. Laganà, Struc-tural order in water: comparison between the spectral analysis of Raman data and mo-lecular dynamics results.

Action D26: Integrative Computational Chemistry, Evaluation Conference and Manage-ment Committee Meeting, Palermo- Sicilia (Italia), marzo 2007, N. Faginas-lago, A. Laganà, A molecular dynamics study of Ion permeability through molecular pores.

International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2006), Creta (Grecia), 27 ottobre-1 novembre 2006, N. Faginas-lago, A. Laganà, A semiclassical initial value representation approach to N + N2 rate coefficient.

VI Convegno nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale GICC, San Servolo-Venezia (Italia), 18-21 dicembre 2006, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Imple-mentazione parallela di algoritmi semiclassici per il calcolo delle costanti di velocità per la reazione N + N2.

6th European Conference on Computational Chemistry (EUCO-CC6), Tàle (Slovacchia), 3-7 settembre 2006, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Quantum vs semiclassical dynamics approaches from highly symmetric to asymmetric reactions

ESCAMPIG XVIII 18th Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics in Ion-ized Gases, Lecce (Italia), 12-16 luglio 2006, N. Faginas-Lago, A. Laganà, From classi-cal to reduced quantum N + N2 reaction: rate coefficients and cross sections.

VII Convegno "Complex Systems: structure, properties, reactivity and dynamics", Alghero - Sardegna (Italia), 13-15 giugno 2005, A. Laganà, N. Faginas-Lago,Thermal rate coefficients for the N + N2 reaction: Quasiclassical, Quantum and Semiclassical calculations.

ICCSA 2005 -Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Tech-nologies, Singapore (Singapore), 9-12 maggio 2005, N. Faginas-Lago, A. Laganà, E. García, X. Guimenez, Thermal rate coefficients for the N + N2 reaction: Quasiclassical, Quantum and Semiclassical calculations

5th European Conference on Computational Chemistry (EUCO-CC5), La monde Les Maures, Hyeres (Francia), 15-20 giugno 2004, N. Faginas-Lago, A. Laganà, A compari-son of SC-IVR and exact quantum collinear atom diatom transition probabilities for mixed reactive and non reactive regimes

24th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RDG), Bari (Italia), 10-16 luglio 2004, N. Faginas-Lago, A. Laganà, A comparison of semiclassical IVR and exact quantum collinear atom diatom transition probabilities for mixed reactive and non reactive regimes.

ICCSA 2003 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Tech-nologies, San Pietroburgo (Russia), 2-4 giugno 2003, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Initial value Semiclassical approaches to reactive and non reactive transition probabilities

COST-European Cooperation in the field of scientific and technical research, Action D23, Budapest (Hungary), giugno 2003, N. Faginas-Lago, Accurate metacomputer quan-tum mechanical studies of the structure, dynamics and spectroscopy of reactive sytems

XXII Convegno Interregionale, Sezione Toscana, Umbra, Marche e Abruzzo TUMA, Terni (Italy), settembre 2003, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Semiclassical initial value representation versus exact quantum reaction probabilities

XXVI International symposium on Free radicals, La Cittadella - Assisi (Italy), settembre 2001, A. Laganà, N. Faginas-Lago, A. Riganelli, Trajectory studies of chemical reactions using bond order coordinates.

Contributi poster (24?.....Contributi poster personalmente presentati)

11th Electronic Structure Principles and Applications - ESPA 2018, Toledo (Spagna) 17-19 luglio 2018, Yusuf B. Apriliyanto, Noelia Faginas-Lago, Andrea Lombardi "Carbon Dioxide and Nitrogen Separation by Multilayer Graphtriyne Membranes: A Molecular Dynamics Study"

European Graphene Forum 2017, Smart Materials and Surfaces - SMS EUROPE 2017, Parigi (France) 26-28 aprile 2017, J. Vekeman, J. Wilson, I. García Cuesta, N. Faginas Lago, J. Sánchez Marin and A. M. Sánchez de Merás, Potentials for CH4, H2O, CO2, N2 and H2 adsorption on grapheme.

IV congresso nazionale della divisione di chimica teorica e computazionale della società chimica italiana, Scuola Normale Superiore, Pisa (Italia) 03-05 ottobre 2016, N. Balucani, D. Stranges, D. Skouteris, N. Faginas-Lago, L. Pacifici, S. Falcinelli, M. Rosi, An exper-imental and theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis

6th EuCheMS Chemistry Congress, Siviglia (Spagna) 11-15 settembre 2016, N. Baluca-ni, D. Stranges, D. Skouteris, N. Faginas-Lago, L. Pacifici, S. Falcinelli, M. Rosi, An experimental and theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis.

1st Italian Workshop on Astrochemistry Astronomical Complex Organic Molecules in Dif-ferent Enviroments, Palazzo Strozzi, Firenze (Italia), 10-11 marzo 2016, M. Rosi, S. Falcinelli, N. Faginas-Lago, N. balucani, P. Casavecchia, D. Skouteris, Dimerization of methanimine and its charged species in the atmosphere of Titan and interstellar/cometary ice analogos

7th Computational chemistry and its Applications Workshop (ICCS2013), Barcelona(Spagna), 5-7 giugno 2013, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, Competitive solvation of K+ by C6H6 and H2O in the K+-(C6H6)n-(H2O)m (n=1,4; m=1,6) aggregates.

Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemist WATOC 2011, Santiago de Compostela (Spagna), 16-22 luglio 2011, N. Fagi-nas-Lago, Molecular dynamics of NMA-NMA and NMA-H2O aggregates using a portable intermolecular potential.

II Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC13), San Gaetano, Padova (Italia), 20-23 febbraio 2013, N. Faginas-Lago, M. Albertí, Competitive solvation of K+ by C6H6 and H2O in the K+-(C6H6)n-(H2O)m (n=1,4; m=1,6) aggregates

XXXIX Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Stresa (Italia) 20-24 settembre 2010, N. Faginas-Lago, A. Laganà, NMA in aqueous solution with intermolecular potentials.

ECAMP10, 10th European Conference on Atoms, Molecules and Photons, Salamanca (Spagna), 5-9 luglio 2010, N. Faginas-Lago, A. Laganà, M. Albertí, NMA-NMA and NMA-H2O potential interactions.

X International Workshop on Quantum Reactive Scattering, Dalian (Cina), 6-10 giugno 2009, N. Faginas-Lago, A. Laganà, F. Huarte-Larrañaga, Initial state-selected reaction probabilities from a minimal number of wave packets.

17th European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC XVIII), San. Pietroburgo (Russia), 23-28 agosto 2008, A. Laganà, N. Faginas-Lago, F. Huarte-Larrañaga, The role of a bent transition state on the N+N2 reactivity: quantum and semi-classical dynamics.

Molecular and Nanodynamics: from atoms to biomolecules", Rome (Italia), 12-13 ottobre 2007, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Semiclassical approach using IVR: thermal rate coefficients for N + N2 reaction.

Convegno Interregionale delle Sezione Toscana Umbria Marche Abruzzo della Società Chimica Italiana TUMA 2007", Assisi (Italia), 26-28 settembre 2007, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Implementazione del metodo SC-IVR per il calcolo delle costante di velocità termalizzate

VI Convegno Nazionale sulla Scienza e Tecnologia dei Materiali, Perugia (Italia), 12-15 giugno 2007, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Comparison between MCTDH and SC$_{IVRmethods:Gridapplications}$

MOLEC XVI European Conference on Dynamics of Molecular Systems, Levico Terme- Trento (Italia), 11-15 settembre 2006, N. Faginas-Lago, E. García, A. Laganà, Semi-classical and Quantum Reduce Approaches for N + N2 reaction: rate coefficients and cross sections

CCP6 Workshop "Semiclassical and Other methods for Understanding Molecular Colli-sions and Chemical Reactions", Belfast (Irlanda) 2-5 aprile 2005, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Thermal rate coefficients for the N + N2 reaction: Quasiclassical, Semiclassical and Quantum calculations

34 Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana, Siena (Italia), 20-24 giugno 2005, A. Laganà, N. Faginas-Lago, Thermal rate coefficients for the N + N2 reaction: Quasiclassical, Quantum and Semiclassical calculations

XXXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Napoli (Italia), 21-25 giugno 2004, N. Faginas-Lago, A. Laganà, A comparison of semiclassical IVR and exact quantum collinear atom diatom transition probabilities for mixed reactive and non reactive regimes

V Edizione del Congresso del Gruppo Italiano di Chimica Computazionale: dal calcolo della Struttura Elettronica alla Bioinformatica (GICC2003), Certosa di Pontignano, Siena (Italia), 18-19 dicembre 2003, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Reaction probabilities : exact quantum and semiclassical Initial Value Representation (SC-IVR) calculations.

Annual meeting of the European Network HPRN-CT- 1999-00005, Bertinoro- Bologna (Italia), novembre 2003, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Semiclassical initial value representation versus exact quantum reaction probabilities.

4th European Conference on Computational Chemistry (EUCO-CC4), La Cittadella, As-sisi (Italia), 1-6 settembre 2002, N. Faginas-Lago, A. Riganelli, A. Laganà, Semiclassical State to State probabilities for a model atom diatom system

XIX International Symposium on Molecular Beams, Università di La Sapienza, Roma (Italia), 3-8 giugno 2001, A. Laganà , N. Faginas-Lago, A. Riganelli, G. Ferraro, An ap-proach to reactive scattering based on non orthogonal coordinates.

VIII International Symposium on Molecular Beams, Arcachon (France), giugno 2000.

- in qualità di partecipante meeting/workshop

Partecipazione al Tech Meeting del tour ERG Re-generation Challenge, la busi-ness plan competition promossa dal Gruppo ERG, con il supporto tecnico di dpixel il 18 -19 gennaio 2017 a Perugia, presso la Facoltà di Ingegneria (DICA), Università di Perugia.

Partecipazione al convegno “Storage Energie Rinnovabili” presso il Dipartimento di Ingegneria Civile ed Ambientale dell’Università degli Studi di Perugia, (Italia) 11 novembre 2016

Partecipazione su invito al COST-Action CM1401 Meeting “Gas phase formation routes of complex organic molecule and isotopic enrichment”, Scuola Normale Superiore, 07-08 marzo 2016, Pisa (Italia)

23 novembre - 08 dicembre 2015: Partecipazione su invito a partecipare al Extended Workshop “Theory of Gas Scattering and Reactivity for astrophysics” Cost Action: CM1401: “Our astrochemical History”, Max Planck Institute (MIAPP), Monaco di Baviera (Germania).

Symposium “Chemical Physics of Low Temperature Plasmas”, Roma (Italia), 31 gennaio -1 febbraio 2011

Advanced Research Workshop on the Dynamics of Elementary Reactions (NATO), Balatonfoeldvar (Ungheria), settembre 2003.

DIDATTICA

DIDATTICA UNIVERSITARIA (NAZIONALE)

• Date (da - a)	A.A 2023/2024
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente per il dottorato in Scienze Chimiche. Corso "Classical Molecular dynamics: BIO molecules applications " presso il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche. 18 ore, 3 CFU
• Date (da - a)	A.A 2021/2022
• Università	Università degli Studi di Perugia

• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente per il dottorato in Scienze Chimiche. Corso "Computational Chemistry and Classical Molecular Dynamics: carbon-nano structures applications" presso il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche. 18 ore, 3 CFU
• Date (da - a)	A.A 2018/2019- A. A. 2019/2020- A. A. 2020/2021- A. A. 2021/2022- A. A. 2022/2023- A. A. 2023/2024- A.A 2024/2025
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del corso di “Dynamics of chemical reactions and statistical mechanics” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (Curricula TCCM) SSD: CHIM/03, 42 ore; 6 CFU.
• Date (da - a)	A. A. 2020/2021- A. A. 2021/2022- A. A. 2022/2023- A. A. 2023/2024 - A.A 2024/2025
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Co-Docente del corso di “ Laboratorio di programmazione e Calcolo” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (Curricula TCCM) SSD: CHIM/03, 04 ore; 2 CFU
• Date (da - a)	A. A. 2020/2021 - A.A 2024/2025
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente dei corsi di allineamento-OFA di Chimica “Chimica Generale e Inorganica” 12 ore, 6 CFU
• Date (da - a)	A. A. 2020/2021- A. A. 2021/2022- A. A. 2022/2023- A. A. 2023/2024- A.A 2024/2025
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del corso di Didattica della Chimica – Modulo 1” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze SSD: CHIM/03, 14 ore; 2 CFU
• Date (da - a)	A. A. 2022/2023- A. A. 2023/2024 – A. A. 2024/2025
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del corso di Environmental Chemistry”– part 2” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze e tecnologie naturalistiche e ambientali SSD: CHIM/03, 47 ore; 6 CFU
• Date (da - a)	A. A. 2019/2020- A. A. 2020/2021- A. A. 2021/2022
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale Docente del corso di “Chimica per L’ambiente”– part 2” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze e tecnologie naturalistiche e ambientali SSD: CHIM/03, 47 ore; 6 CFU
• Date (da - a)	A. A. 2020/2021- A. A. 2021/2022 - A. A. 2022/2023- A. A. 2023/2024
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale Docente del corso di “Chimica Generale e Inorganica” per il corso di SCIENZE DELLA FORMAZIONE PRIMARIA (Laurea Magistrale Ciclo Unico 5 anni; SSD: CHIM/03, 24 ore; 4 CFU
• Date (da - a)	A.A 2018/2019
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del corso di “Chimica Computazionale” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (Curricula TCCM) SSD: CHIM/03, 42 ore; 6 CFU.

• Date (da - a)	A.A 2017/2018
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del modulo di “Meccanismi e Dinamica delle Reazione Chimiche: Fondamenti Teorici” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (Curriculum TCCM) SSD: CHIM/03, 42 ore; 6 CFU.
• Date (da - a)	A.A 2016/2017
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del corso di “Meccanismi e Dinamica delle Reazione Chimiche: Fondamenti Teorici” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (Curriculum TCCM) SSD: CHIM/03, 42 ore; 6 CFU.
• Date (da - a)	A.A 2016/2017
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente per il dottorato in Scienze Chimiche. Corso "Molecular Dynamics Simulations" presso il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche per i dottorandi del XXX, XXXI e XXXII ciclo. 18 ore
• Date (da - a)	A.A 2015/2016
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del corso di “Chimica Computazionale” per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (Curricula TCCM) SSD: CHIM/03, 42 ore; 6 CFU.
• Date (da - a)	A.A 2014/2015
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occasionale. Attività di Tutorato retribuita per il corso ufficiale “Chimica e Biochimica” (CHIM/03) del Corso di Laurea Interdipartimentale in Produzioni Animali per 25 ore.
• Date (da - a)	A.A 2008/2009
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Docente del corso di “Gestione in rete di basi di conoscenza molecolari” (CHIM/03) nel CdL Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN per 48 ore; 6 CFU.
• Date (da - a)	A.A 2008/2009
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occasionale. Titolare di un modulo per il corso “Chimica Computazionale” della Laurea Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN; 1 CFU.
• Date (da - a)	A.A 2007/2008
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale.Docente del corso di “Gestione in rete di basi di conoscenza molecolari” (CHIM/03) nel CdL Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN per 48 ore; 6 CFU.
• Date (da - a)	A.A 2004/2005
• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	AContratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occassionale. Attività di Tutorato retribuita per il corso ufficiale “Chimica Computazionale” (CHIM/03) della Laurea Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN per 10 ore.
• Date (da - a)	A.A. 2002/2003

• Università	Università degli Studi di Perugia
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale. Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occassionale Attività di Tutorato ufficiale per il corso "Chimica Computazionale" (CHIM/03) della Laurea Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN.

ATTIVITÀ DIDATTICA UNIVERSITARIA (ESTERO)

• Date (da - a)	23- 27 settembre 2019
• Università	Universidad de la Rioja, Departamento de Química, Logroño (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	1-10 aprile 2019
• Università	Universidade Vigo, Departamento de Química-Fisica, Vigo (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	14-18 maggio 2018
• Università	Universidad de la Rioja, Departamento de Química, Logroño (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	09 -18 aprile 2018
• Università	Universidade Vigo, Departamento de Química-Fisica, Vigo (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	20-22 settembre 2017
• Università	Universidad de Valencia (Spagna).
Principali mansioni e responsabilità	Lezioni frontali ed esercitazioni di "Molecular Dynamics" nella scuola di master internazionale "XIIth-IIC- European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EMTCCM)", Valencia (Spagna), 4-29 settembre 2017 parte del master Europeo "TCCM (EM-TCCM)".
• Date (da - a)	29 gennaio-04 febbraio 2017
• Università	Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	03-10 maggio 2017
• Università	Universidad de la Rioja, Departamento de Química, Logroño (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	05-10 settembre 2016
• Università	Universidad de Barcelona, Departament de Ciència de Materials i Química Física, Barcelona (Spagna)

• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	12-20 maggio 2016
• Università	Universidad de la Rioja, Departamento de Química, Logroño (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	14-21 aprile 2016
• Università	Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, (Spagna)
• Tipo di impiego	Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
Principali mansioni e responsabilità	Didattica e Ricerca
• Date (da - a)	9-10 settembre 2013
• Università	Universidad Autonoma de Madrid (Spagna).
Principali mansioni e responsabilità	Lezioni frontali ed esercitazioni di “Molecular Dynamics” nella scuola di master internazionale “8th International Intensive Course European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (EU-TCCM)”, Madrid (Spagna), 02-27 settembre 2013 parte del master Europeo “TCCM (EM-TCCM)”.
• Date (da - a)	A.A 2004/2005
• Università	Facultad de Ciencias y tecnologia, Universidad del País Vasco, Vitoria, Spagna
• Tipo di impiego	Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale
Principali mansioni e responsabilità	Docente del corso di “Prácticas de Laboratorio de Ciencias Ambientales” nel CdL Ciencias Ambientales per 30 ore.

Attività didattica presso corsi Internazionali svolta in Italia dietro invito ed in particolare

3. 08 giugno 2017. Università degli studi di Perugia. Lezione frontali e hands-on di “Molecular Dynamics” nella scuola di dottorato “School on Open Science Cloud”, Perugia, 5-9 Giugno 2017 (http://fisgeo.unipg.it/ sosc17/index.html) parte del dottorato Europeo “European Joint Doctorate on TCCM (ITN-EJD-TCCM)”.

2. Settembre 2012. Dipartimento di Matematica e Informatica dell’Università degli Studi di Perugia. Corsi “Molecular Dynamics simulations of hydrogen adsorption” e “Virtual communities and EChemTest®” presso 7th International Intensive Course European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (EU-TCCM).

1. Settembre 2006- Dipartimento di Chimica dell’Università degli Studi di Perugia. Corsi “Scattering Theory” e “Catalysis and Reactivity” presso 1st International Intensive Course European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (EU-TCCM).

Membro di giuria per esami finali di dottorato esteri

• Date (da - a)	16 ottobre 2018
• Università	Université de Toulouse - Paul Sabatier (Francia)
• Tipo di impiego	Membro di Giuria
Principali mansioni e responsabilità	Membro della commissione dell’esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca dello studente Stefano Battaglia. Titolo: Electronic Structure and Molecular Dynamics Applications of Carbon Nanotubes.

• Date (da - a) 31 ottobre 2012
• Università Univesitat de Barcelona, Barcelona (Spagna)
• Tipo di impiego Membro di Giuria
Principali mansioni e responsabilità Membro della commissione dell'esame finale per il conseguimento del titolo di Dottore di Ricerca dello studente Marc Moix Teixidor. Titolo: Applicazioni e sviluppo di metodi meccanicci e quantistici multiconfigurazionali per lo studio delle reazioni chimiche.

E-learning e internazionalizzazione della didattica

Partecipazione ECTN General Assembly and Virtual Education Community Meeting, Cracovia (Polonia) 11-14 aprile 2019

Partecipazione Workshop of the ITN European Joint Doctorate in "Theoretical Chemistry and Computational Modelling" , Pisa (Italia), 23-25 luglio 2018 and the Supervisory Board Meeting Pisa (Italia), 26 luglio 2018

Partecipazione Training event: " Deploying EchemTest exams with the new Platform", Praga 18-22 aprile 2018.

Partecipazione ECTN General Assembly, Praga 21-22 aprile 2018

Partecipazione Training event: " Deploying EchemTest exams with the new Platform", Valletta (Malta) 02-03 aprile 2017

Partecipazione al Mid Term Meeting EJD-TCCM come supervisor di due stu-denti di dottorato Europei presso il programma ITN- European Joint Doctorate (EJD-TCCM) 15-17 dicembre 2016 Madrid (Spagna).

Partecipazione EchemTest-Training event: "Deploying EchemTest exams with the new Platform", Perugia (Italia) 15-16 settembre 2016.

Partecipazione al 1st Annual Meeting EJD-TCCM come supervisor di due studenti di dottorato Europei presso il programma ITN- European Joint Doctorate (EJD-TCCM) 17-21 luglio 2016 Parigi (Francia).

Preparazione del progetto Europeo dal titolo "Erasmus+ Capacity building in the field of higher education"ECTN VII" Project Frame" con lo scopo di creare un link tra il settore di Education e ricerca delle Università nell'ambito della Chimica e l'Ingegneria chimica per tutte le due tipologie di lauree, triennale e Magistrale

Partecipazione al meeting "ECTN General Assembly 2016" rappresentando il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Pe-rugia all'interno della l'Associazione ECTNA. Inoltre, come Group leader delle li-brerie di "Computational Chemistry level 4" ho presentato la nuova piattaforma EOL per i test elettronici in Chimica, 24-26 aprile 2016, Gdansk (Polonia

Partecipazione al meeting "DRAG meets VEC" per lo sviluppo di nuove Librerie di Chimica per la piattaforma EChemTest® e successivo sviluppo della nuova piattaforma EOL, 20-21 novembre 2015, Trieste (Italia).

Partecipazione Training event: " Tools for e-learning and e-Assessment: Glorep and EOL", Perugia (Italia) 15-16 settembre 2016

8-29 maggio 2013: Partecipazione al meeting "GLorep-EoL presentation and developments" all'interno della collaborazione scientifica in corso con Aristotle University of Thessaloniki.

16-20 gennaio 2013: Partecipazione al meeting "EChemTest® IT-Experts meeting" and "VEC Standing Committee meeting" presso il Dipartimento di Chimica della Aristotle University of Thessaloniki all'interno del progetto "Valorization of EChemTest® Testing Centers" .

COLLABORAZIONI SCIENTIFICHE NAZIONALI O INTERNAZIONALI

• Date (da - a)	2017- ad oggi
• Descrizione	Prof. M. Mandando e Prof. Juan Jose Hermida (Universida Vigo (Spagna). Argomento:Analisi e sviluppo di modelli per le interazioni tra le diossine e il grafene.
• Principali mansioni e responsabilità	Referente italiano, ricerca
• Date (da - a)	2018- ad oggi
• Descrizione	Prof. Juan José Nogueira (Universida Autonoma de Madrid (Spagna). Argomento:.....
• Principali mansioni e responsabilità	Referente italiano, ricerca
• Date (da - a)	2015- ad oggi
• Descrizione	Prof. Alfredo Sánchez de Merás (Instituto de Ciencia Molecular), Valencia (Spagna). Argomento: Adsorption of Hydrogen Molecules on Carbon Structures: from First Principles to Molecular Dynamics
• Principali mansioni e responsabilità	Referente italiano, ricerca
• Date (da - a)	2006- ad oggi
• Descrizione	Prof. Fermin Huarte Larrañaga (Universitat de Barcelona), Barcelona (Spagna). Argomento: Implementation of a SC-IVR program in the Grid environment to calculate atom-diatom rate coefficients and compare with MCTDH results.
• Principali mansioni e responsabilità	Referente italiano, ricerca
• Date (da - a)	2010 - ad 2018
• Descrizione	Prof.ssa Margarita Albertí (Universitat de Barcelona), Barcelona (Spagna). Argomento: Molecular Dynamics Study: molecules with a peptide group.
• Principali mansioni e responsabilità	Referente italiano, ricerca
• Date (da - a)	2011 - ad oggi
• Descrizione	Dr. Y. Wang (Universidad Autonoma de Madrid e Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia), Madrid, (Spagna). Argomento: Adsorption of Hydrogen Molecules on Carbon Nanotubes.
• Principali mansioni e responsabilità	Referente italiano, ricerca
• Date (da - a)	2003 - ad oggi
• Descrizione	Prof. Ernesto García Para (Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea Química Física), Basque Country, (Spagna). Argomento: Implementation of a semiclassical code on the EGEE GRID.
• Principali mansioni e responsabilità	Referente italiano, ricerca

ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI (PROGETTI SCIENTIFICI FINANZIATI)

• Date (da - a)	14-19 ottobre 2024
• Descrizione	Mobilità IN ENTRATA (incoming) per ricercatori di chiara fama internazionale (Visiting researcher). Docente: Prof. Juan Jose Nogueira in servizio presso l'Universidad Autonoma de Madrid (Spagna).
• Principali mansioni e responsabilità	Proponente e responsabile scientifico del progetto finanziato e deliberato dal C.d A n.443/2024
• Date (da - a)	maggio 2019 – maggio 2022
• Descrizione	ITN-EJD in AstroChemical Origins (ACO) ITN 2018: Innovative Training Networks (ITN) Call: H2020-MSCA-ITN-2018 TCCM". Codice progetto: 811312 (European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Curie Sklodowska-Curie).
• Principali mansioni e responsabilità	Responsabile scientifico di unità e supervisore dello studente di dottorato Emilia de Aragao in collaborazione con l'Università Grenoble –Alpes-IPAG, France. Progetto finanziato per 4.138.452 Euro. Titolo progetto in studio: Quantum chemical computations on gas phase neutral-neutral reactions of interstellar molecules.
• Date (da - a)	2019-ad oggi (2025)
• Descrizione	European Mundus Joint Master Degrees "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM) Master". (Progetto finanziato per 4. 424.000 Euro)
• Principali mansioni e responsabilità	Responsabile per il nodo di Perugia all'interno del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia. Responsabile scientifico e Coordinatore della TCCM e-learning platform
• Date (da - a)	08-06-2016 al 17-07-2016
• Descrizione	Mobilità IN ENTRATA (incoming) per ricercatori di chiara fama internazionale (Visiting researcher). Docente: Prof. ssa Margarita Albertí Wirsing in servizio presso l'Universitat de Barcelona (Spagna).
• Principali mansioni e responsabilità	Proponente e responsabile scientifico del progetto.
• Date (da - a)	gennaio 2016- 31 dicembre 2018
• Descrizione	Fondo d'Ateneo per la ricerca di base 2014-Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie. Titolo: "Studio teorico del legame peptidico attraverso tecniche di dinamica molecolare e sviluppo di potenziali in armoniche sferiche e ipersferiche".
• Principali mansioni e responsabilità	Responsabile scientifico del progetto
• Date (da - a)	01 novembre 2015- 31 dicembre 2018
• Descrizione	ITN-EJD in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM) ITN 2014: Innovative Training Networks (ITN) Call: H2020-MSCA-ITN-2014 TCCM". Codice progetto: 642294 (European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Curie Sklodowska-Curie).

• Principali mansioni e responsabilità

Co- responsabile scientifico dell'Università degli Studi di Perugia, membro del Supervisory Board del progetto Europeo. Supervisore scientifico di tre studenti di dottorato (Stefano Battaglia, Carles Martí Aliod e Jelle Vekeman) in co-tutela con tre università Europee (Université di Toulouse (Francia) e Universidad de Valencia (Spagna)), rispettivamente

• Date (da - a)

2014 ad oggi

• Descrizione

Working Group Leader del WG EchemTest® (http://ectn.eu/committees/virtual-education-community/echemtest/computational-chemistry-4/) per la gestione del database delle librerie di Chimica Computazionale- Livello 4- presso la associazione Europea "European Chemistry Thematic Network Association" (http://ectn.eu) EchemTest® rappresenta un insieme di test sviluppati all'interno della associazione ECTN-A che hanno come obbiettivo la valutazione delle conoscenze e competenze nel campo della Chimica.

• Date (da - a)

2009 - 2016

• Descrizione

7th European Mundus Joint Master Degrees "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM) Master

• Principali mansioni e responsabilità

Co-responsabile scientifico e coordinatore del progetto all'interno del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie.

• Date (da - a)

2006 - 2016

• Descrizione

Presidente di MASTER-UP srl (spin-off Universitario).

PARTECIPAZIONE A PROGETTI SCIENTIFICI FINANZIATI (COORDINATORE E RESONSABILITA SCIENTIFICA)

• Date (da - a)

01 ottobre 2024 ad oggi

• Descrizione

European Mundus Joint Master Degrees "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM) Master- ERASMUS-EDU-2024-PEX-EMJM-MOB" (progetto finanziato per €3,936,000.00- num. 101180348

• Principali mansioni e responsabilità

Coodinatore del progetto a livello locale UNIPG

• Date (da - a)

2019-2023

• Descrizione

European Mundus Joint Master Degrees "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM) Master". (Progetto finanziato per 4. 424.000 Euro)

• Principali mansioni e responsabilità

Responsabile per il nodo di Perugia all'interno del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia. Responsabile scientifico e Coordinatore della TCCM e-learning platform.

• Date (da - a)

maggio 2019 – maggio 2022

• Descrizione

ITN-EJD in AstroChemical Origins (ACO) ITN 2018: Innovative Training Networks (ITN) Call: H2020-MSCA-ITN-2018 TCCM". Codice progetto: 811312 (European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Curie Sklodowska-Curie).

• Principali mansioni e responsabilità

Responsabile scientifico di unità e supervisore dello studente di dottorato Emilia de Aragao in collaborazione con l'Università Grenoble –Alpes-IPAG, France. Progetto finanziato per 4.138.452 Euro. Titolo progetto in studio: Quantum chemical computations on gas phase neutral-neutral reactions of interstellar molecules.

• Date (da - a)	08-06-2016 al 17-07-2016
• Descrizione	Mobilità IN ENTRATA (incoming) per ricercatori di chiara fama internazionale (Visiting researcher). Docente: Prof. ssa Margarita Albertí Wirsing in servizio presso l'Universitat de Barcelona (Spagna).
• Principali mansioni e responsabilità	Proponente e responsabile scientifico del progetto.
• Date (da - a)	gennaio 2016- 31 dicembre 2018
• Descrizione	Fondo d'Ateneo per la ricerca di base 2014-Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie. Titolo: "Studio teorico del legame peptidico attraverso tecniche di dinamica molecolare e sviluppo di potenziali in armoniche sferiche e ipersferiche".
• Principali mansioni e responsabilità	Responsabile scientifico del progetto
• Date (da - a)	2009- 2015
• Descrizione	7th European Mundus Joint Master Degrees "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM) Master
• Principali mansioni e responsabilità	Co-responsabile scientifico e coordinatore del progetto all'interno del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie.

PARTECIPAZIONE A PROGETTI SCIENTIFICI FINANZIATI (Partecipante all'unità operativa)

• Date (da - a)	
• Descrizione	BEYOND
• Principali mansioni e responsabilità	
• Date (da - a)	
• Descrizione	ASI
• Principali mansioni e responsabilità	
• Date (da - a)	
• Descrizione	PRIN2022-MARZIO
• Principali mansioni e responsabilità	
• Date (da - a)	
• Descrizione	UNINUVOLA
• Principali mansioni e responsabilità	
• Date (da - a)	23-09-2015 a 23-09-2019
• Descrizione	SIR (Scientific Independence of young Researchers) 2014 dal titolo "ORCHID an integrated search of stereodynamical mechanisms on the ORigin of CHIral Discrimination by oriented molecular beams, synchrotron radiation, molecular dynamics and computational modeling", codice RBSI14U3VF.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa locale, Università degli Studi di Perugia

• Date (da - a)	23 ottobre 2018 a 22 ottobre 2020
• Descrizione	Fondo d'Ateneo per la ricerca di base 2017-Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie. Titolo:Reactive Scattering of oxygen atoms with aromatic compounds and carbon-containing solid surfaces.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dalla Prof. ssa N. Balucani, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	20 luglio 2015 a 31 maggio 2018
• Descrizione	Fondazione Cassa di Risparmio di Perugia. Titolo progetto: Verso l'ottimizzazione dei processi di combustione tramite lo studio dettagliato dei meccanismi molecolare. Codice progetto: 2015.0331.021
• Principali mansioni e responsabilità	artecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. ssa P. Casavecchia, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	10 luglio 2014 a 30 novembre 2016
• Descrizione	Fondazione Cassa di Risparmio di Perugia. Titolo progetto: Per una combustione pulita dei biocarburanti: studio sperimentale e teorico dei meccanismi di formazione di inquinanti ossigenati. Codice progetto: 2014.0253.021
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. ssa N. Balucani, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	01-06-2010 a 30-04-2014
• Descrizione	FP7-SPACE-2009-. TITOLO: Planetary Entry Integrated Model, Project No: 242311.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa locale, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	01-10-2010 a 30-09-2012
• Descrizione	2009- Lifelong Learning Programme/Erasmus Curriculum 12 Development Project 502271-LLP-1-2009-1- GR-Erasmus-ECDSD.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	22-03-2010 a 22-09-2012
• Descrizione	PRIN 2008 prot. 2008KJX4SN$_0 03.TITOLO$: $Daiprocessielementariallamodellisticaaccuratadisistemicomplessi$
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'unità Operativa locale, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	01-02-2010 a 31-01-2013
• Descrizione	Progetto del MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN Dirección General de Programas y Transferencia de Conocimiento (Spagna) TITOLO: 2009-"Dinámica Cuántica de Reacciones en sistemas poliatómicos y modelización de fisisorción de gases en nanoestructuras"- CTQ2009-12216/BQU.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. Fermin Huarte Larranaga, Universidad de Barcelona (Spagna)
• Date (da - a)	01-11-2010 a 31-10-2011
• Descrizione	Joint Interface Third-Cycle Degrees in Chemistry-Lifelong Learning Programme/Erasmus/Curriculum Development Projects 502271-LLP-1-GR-Erasmus-ECDSP.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	01-02-2010 a 31-01-2013
• Descrizione	2009- Echem-TC-Valorisation of EChemTest testing centers n. 504854-LLP-2009-GR-KA4-KA4MP.

• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	15-06-2009 a 15-12-2011
• Descrizione	ARPA Umbria: Adeguamento della catena modellistica previsionale della qualità dell'aria nella regione Umbria.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	12-09-2008 a 11-09-2011
• Descrizione	ESA ESTEC:21790/08/NL/HE Fundamental issues in the aerothermodynamics of planetary atmosphere reentry.
• Principali mansioni e responsabilità	Fellow del progetto per 36 mesi.
• Date (da - a)	01-01-2009 a 31-12-2009
• Descrizione	Progetto del MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN Dirección General de Programas y Transferencia de Conocimiento (Spagna) TITOLO: 2008-Teoría y modelización de reacciones poliatómicas y simulación procesos heterogéneos.- CTQ2008-6000/BQU.
• Principali mansioni e responsabilità	Fellow del progetto e partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. Fermin Huarte Larranaga, Universidad de Barcelona (Spagna).
• Date (da - a)	27-04-2006 a 30-09-2007
• Descrizione	Fondazione Cassa di Risparmio di Perugia. Titolo progetto: Determinazione di acidi grassi polinsaturi del plasma come indice di rischio/protezione della malattia. Codice progetto: 2005.020.408. Bando a tema 2005 sviluppo tecnologico.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.
• Date (da - a)	2007 (48 mesi)
• Descrizione	Collaborazione alla realizzazione di progetto di ricerca, sviluppo e applicazione mirate a soluzioni chimiche ed informatiche innovative- Selerant.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante
• Date (da - a)	2006 -2010
• Descrizione	ARPA Umbria: Titolo progetto: Studi modellistico della qualita dell'aria nella Regione Umbria.
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.
• Date (da - a)	11-06-2003 a 14-10-2005
• Descrizione	2004- FIS-CNR-MIUR: Calcolo a priori dell'efficienza di reazioni elementari di interesse atmosferico CU03.00130 SR/98
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia
• Date (da - a)	2004 (24 mesi)
• Descrizione	004- CNR MIUR Legge 449/97: Piattaforma distribuita ad alte prestazioni-ambiente di programmazione e componenti di knowledge discovery ad alte prestazioni
• Principali mansioni e responsabilità	Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.
• Date (da - a)	2004-2005

• Descrizione: Fondazione Cassa di Risparmio di Perugia. Titolo progetto: VirtChemRisk: strumenti di realtà virtuale per l'educazione al rischio su base molecolare.

• Principali mansioni e responsabilità: Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.

• Date (da - a): 30-11-2004 a 05-01-2007

• Descrizione: PRIN2004: Proprietà reattive e spettroscopiche di aggregati molecolari in fasci supersonici e sviluppo di una modellistica unificante. prot. $2004033958_{0}02$

• Principali mansioni e responsabilità: Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.

• Date (da - a): 16-12-2002 a 22-01-2005

• Descrizione: PRIN2002: Esperimenti e simulazioni di proprietà strutturali e dinamiche di aggregati molecolari in fasci supersonici. prot. $2002037495_{0}02$

• Principali mansioni e responsabilità: Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.

• Date (da - a): 01-10-2002 a 30-09-2005

• Descrizione: 2002-10066-CP-3-2002-1-FR-ERASMUS-TN: ECTN 2 - European Chemistry Thematic Network 2

• Principali mansioni e responsabilità: Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.

• Date (da - a): 2003 (24 mesi)

• Descrizione: 2003- Piattaforma abilitanti per griglie computazionali a elevate prestazioni orientate a organizzazioni virtuali scalabili.

• Principali mansioni e responsabilità: Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia.

• Date (da - a): 10-01-2001 a 30-11-2002

• Descrizione: COFIN (Programmi di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale) 2000 prot. $MM03105343_{0}02.TITOLO$: $Studiodiaggregatimolecolariincondizionicontrollateedinamichedireazioneinfascimolecola$

• Principali mansioni e responsabilità: Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia

• Date (da - a): 19-07-2000 a 21-12-2005

• Descrizione: 2000-CEE-COSTD23 num ICC2-CT-2000-01057

• Principali mansioni e responsabilità: Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. A. Laganà, Università degli Studi di Perugia

SUPERVISORE DI TESI DI DOTTORATO

4. Dottoranda: Emilia de Aragao. (Università di Perugia – master-up srl) dottorato di ricerca internazionale H2020-MSCA-ITN-2018.811312 del titolo: "Quantum chemical computations on gas phase neutral-neutral reactions of interstellar molecules". Disertazione: 30 gennaio 2023 presso l'Università degli Studi di Perugia (Italia)

3. Dottorando: Jelle Vekeman. (Università di Perugia in co-tutela con l'Universidad de Valencia (Spagna) per la tesi finale del dottorato di ricerca internazionale ITN-EJD: TCCM.642294 del titolo: "Adsorption of gases on graphene: Ab initio, Molecular Dynamics and Monte Carlo studies". Disertazione: 11 luglio 2019 presso l'Universidad de Valencia (Spagna).

2. Dottorando: Carles Martí Aliod. (Università di Perugia in co-tutela con l'Uiversité Paul-Sabatier, Tolosa (Francia) per la tesi finale del dottorato di ricerca internazionale ITN-EJD: TCCM.642294 del titolo: "Networked computing for ab initio modeling the chemical storage of renewable energy". Disertazione: 14 dicembre 2018 presso l'Università di Perugia (Italia).

1. Dottorando: Stefano Battaglia. (Università di Perugia in co-tutela con l'Uiversité Paul-Sabatier, Tolosa (Francia) per la tesi finale del dottorato di ricerca internazionale ITN-EJD: TCCM.642294 del titolo: "Electronic Structure and Molecular Dynamics Applications of Carbon Nanotubes". Disertazione: 16 ottobre 2018 presso l'Uiversitè Paul-Sabatier (Francia).

SUPERVISORE DI TESI DI LAUREA MAGISTRALE e LAUREA TRIENNALE

• Date (da - a)

2005 ad oggi

Relatrice o co-relatrice di 16 tesi di Laurea Magistrale, come da elenco seguente:

*EM-TCCM: European Master Theoretical Chemistry and Comuptational Modeling

16. A. A. 2023/2024 (co-relatrice) Laureando:Umberto Pelliccia (Università di Perugia in collaborazione con .....) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo: "....."

15. A. A. 2023/2024 (relatrice) Laureando:Luis Daniel Solis Rodriguez (Università di Perugia in collaborazione con l'Universidad Autonoma de Madrid (Spagna)) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo: "Exploring the Interaction between Psychedelics and the 5-HT2A Receptor by Classical and Quantum Approaches "

14. A. A. 2023/2024 (relatrice) Laureanda: Amanda H. Tzorín (Università di Perugia in collaborazione con l'Universitat de Valencia (Spagna)) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo: "Quantifying electron correlation along the excited state decay of Tully surrogate molecular models"

13. A. A. 2022/2023 (relatrice) Laureanda: Atena Salek (Università di Perugia in collaborazione con l'Universidad Autonoma de Madrid (Spagna)) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del titolo: "Computational Modelling of Ion Conduction through ORF3a Channel

12. A. A. 2021/2022 (relatrice) Laureando: Ribi Akbar (Università di Perugia in collaborazione con LAAS-CNRS, Université Toulouse III - Paul Sabatier (Francia))) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del titolo: "Molecular Dynamics Study of potential inhibitors of viral protein SARS-COV-2 3A"

11. A. A. 2021/2022 (relatrice) Laureando: Leonardo Moriconi (Università di Perugia in collaborazione con LAAS-CNRS, Université Toulouse III - Paul Sabatier (Francia))) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del titolo: "Theoretical study of the pyridine interaction on ice grains in the astrochemical field"

10. A. A. 2021/2022 (co-relatrice) Laureanda: Gabriella Di Genova (Università di Perugia in collaborazione con LAAS-CNRS, Université Toulouse III - Paul Sabatier (Francia))) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del titolo: "Theoretical study of the impact of metals on (Star)dust formation: focus on Ag-PAH clusters."

9. A. A. 2021/2022 (co-relatrice) Laureando: Amanda Covarelli (Università di Perugia) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del titolo: "Classificazione di strutture e proprietà di biomolecole mediante metodi di machine learning"

8. A. A. 2021/2022 (co-relatrice) Laureando: Fioccola Simone (Università di Perugia in collaborazione con LAAS-CNRS, Université Toulouse III - Paul Sabatier (Francia)) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo: "QM/MM study of the post-translational modification mechanism of acyl carrier by 4'-phosphopantetheinyl transferases"

7. A. A. 2019/2020 (relatrice) Laureando: Hannah Pollak (Università di Perugia in collaborazione con l'Universidad Autonoma de Madrid (Spagna)) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo: "Force Field Assessment and Molecular Dynamics of Na^+/K^+ Conduction Through a Human Voltage-Gated Sodium Channel"

6. A. A. 2017/2018 (co- relatrice) Laureando: Goran Giudetti (Università di Perugia in collaborazione con l'University of Groningen) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo: "Dynamical and Spectral Properties of DNA G-quadruplex and Azobenzene Photoswitch"

5. A. A. 2016/2017 (relatrice) Laureando: Yusuf Bramastya Apriliyanto (Università di Perugia in collaborazione con La Université Toulouse III- Paul Sabatier) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo "Theoretical studies of Graphenic Nanotubes"

4. A.A. 2015/2016 (relatrice) Laureando: Matteo Bazzurri (Università di Perugia) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del titolo "From benchmark to real astrochemical reaction quantum calculations using a coordinated distributed computational frame".

4. A.A. 2013/2014 (co- relatrice) Laureando: Rami Ali Mohamed Shafei (Università di Perugia in collaborazione con La Universidad Autonoma de Madrid, Spagna) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* in Scienze Chimiche del titolo "Solvation structure of Na+".

3. A.A: 2012/2013 (relatrice) Laureando: Md Bin Yeamin (Università di Perugia in collaborazione con La Universidad de Valencia, Spagna) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo "Molecular Modelling and Simulation of Hydrogen Adsorption over Graphene" .

2. A. A. 2011/2012 (co- relatrice) Laureanda: Dilara Oksuk (Università di Perugia in collaborazione con l' Universidad Autonoma de Madrid, Spagna) per la tesi finale del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche EM-TCCM* del titolo "Adsorption of hydrogen molecules on carbon nanotubes using quantum chemistry and molecular dynamics".

1. A. A. 2005/2006 (co- relatrice) Laureanda: Laura Caponi (Università di Perugia) per la tesi finale della Laurea Magistrale in Informatica del titolo "Implementation of the Semiclassical parallel algorithms for the molecular dynamics".

co-relatrice di 1 tesi di Laurea triennale, come da elenco seguente:

1. A. 2018/2019 (co- relatrice) Laureando: Sara Alunno Rufini (Università di Perugia) per la tesi finale del Corso di Laurea triennale in Chimica del titolo: "Studio FTIR di proprietà strutturali di miscele etilammonio nitrato-acqua ed etilammonio nitrato-etanolo"

TERZA MISSIONE

dal 2019—master-tec srl

Dal luglio 2016 sono socio collaboratore di MASTER-UP srl.

Dal 2006-2016 Presidente di MASTER-UP srl (spin-off Universitario). MASTER-UP è una SME nata come spin-off universitario, dalla convergenza di alcune linee di ricerca in simulazioni di dinamica molecolare con tecnologie informatiche avanzate. 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.

Attività di gestione e organizzzione per MASTER-UP SRL:

Tutor aziendale

. ottobre 2009- dicembre 2009 tirocinio (150 ore) dello studente Andrea Manfucci, Laurea specialistica in Informatica dell'Università di Perugia (Anno accademico 2008/2009) con il progetto "Implementazione di un data base relazionale per la produzione di crediti virtuali per applicazioni distribuite in grid ".

. ottobre 2009- dicembre 2009 tirocinio (150 ore) dello Studente Danilo Nalli, Laurea specialistica in Informatica dell'Università di Perugia (Anno accademico 2008/2009) con il progetto "Sviluppo di applicazione per GPU".

. ottobre 2009- dicembre 2009 tirocinio (150 ore) dello Studente Davide Ciambelli Laurea specialistica in Informatica dell'Università di Perugia (Anno accademico 2008/2009) con il progetto "Implementazione di un sistema intelligente per l'esecuzione distribuita di applicazioni in grid ".

. dicembre 2014 - marzo 2015 tirocini (480 ore) dello studente Fabio Tavernelli come parte dell'attività formativa dei Corsi di Studio inerenti i Master di Informatica erogati dall'Ente di formazione PAFAL.

. ottobre 2016 Tirocinio di formazione e orientamento degli studenti (160 ore) dello studente Iulia Maria Baldini, laureanda in Economia e Management presso la ditta MASTER-UP srl dal 28-09-2016 al 25-10-2016 .

Gestione e Organizzazione eventi tramite MASTER-UP SRL

. Organizzazione della "Quinta edizione del Convegno Nazionale sul Particolato Atmosferico (PM2012)" in collaborazione con ARPA Umbria dal 16-18 Maggio 2012.

. Organizzazione WG3 Annual Meeting "Oxygen in Planetary Systems" all'interno della COST action CM 0805 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia dal 17-18 settembre 2012.

. Organizzazione IV Workshop della Società Italiana di AstroBiologia: "From Astrophysics to Astrochemistry Towards Astrobiology" presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia dal 19-21 settembre 2012.

Gestione di attività di ricerca tramite la impresa Master-up

"Progetto Zero Web" in Collaborazione con Esebel srl dell'interno del Programma di animazione per lo sviluppo di progetti aziendali di innovazione nelle PMI umbre annualità 2013 (Umbria innovazione Scarl). (2013) 4070 Euro Tema del progetto: Progettazione e realizzazione di un prototipo per un dispositivo mobile a basso costo autoalimentato, che permetta di realizzare l'accesso a specifici contenuti web tramite connessione WiFi utilizzando smartphone, tablet o qualsiasi altro dispositivo in grado di connettersi in WiFi.

Indesit: Attività di consulenza per test di laboratorio su coating easy to clean per elettrodomestici ambito cottura. Progetto I2015-Energy. (2013) 8558 Euro

EuCheMS: Definizione, Configurazione, Installazione, Personalizzazione, Testing, Tuning e messa in Produzione dei Servizi di Posta Elettronica e Registrazione Web per l'organizzazione EuCheMS. Sviluppo e mantenimento del sito (http://euchems.hpc.unipg.it/euchemsga/) per la registrazione agli eventi EuCheMS.

PLUG INNOVATION: progetto integrato per lo sviluppo delle risorse umane negli spin off: Regione Umbria relativo al POR – FSE 2007-2013. Obiettivo 2 Competitività regionale ed occupazione. Asse I Adattabilità, Asse II Occupabilità, Asse IV Capitale Umano. Finanziamento per un assegno di ricerca della durata 12 mesi, per lo sviluppo di applicazioni software finalizzate al reperimento automatico di informazioni all'interno di database relazionali in modo da poter costruire la scheda di un prodotto che fornisca tutte le informazioni necessarie a catalogarlo in base alla sua tossicità.

CAPACITÀ E COMPETENZE PERSONALI

Madrelingua

Spagnola

Altre lingue

Inglese

capacità di lettura: Eccellente
capacità di scrittura: Eccellente
capacità di espressione orale: Eccellente

Italiano

capacità di lettura: Eccellente
capacità di scrittura: Eccellente
capacità di espressione orale: Eccellente

Altre lingue

Tedesco

principiante livello A1

Capacità e competenze organizzative

La capacità e le competenze organizzative sono testiomaniate dalla gestione scientifica e finanziaria dei progetti finanziati elencati precendentemente (ITN2014, ITN2018, EM-TCCM) ottenuti come responsabile di unità locale. Oltre alla gestione del finanziamento stesso, la sottocritta ha personalmente coordinato il gruppo di ricerca.

Inoltre, la sottocritta ha anche partecipato al comitato organizzatore dei seguenti eventi e congressi scientifici:

2019: Workshop "Theoretical and Computational Chemistry and its Applications" dell'ICCSA2019- 19th International Conference on Computational Science and Applications, San Pietroburgo (Russia), 01-04 Luglio 2019 (membro Scientific Organizing Committee).

2018 13th International Intensive Course European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (EU-TCCM) presso il Dipartimento di Matematica e Informatica dell'Università di Perugia, (Italia) 3-28 settembre 2018. (membro Scientific Organizing Committee e Local Organizing Committee).

2018: Workshop "Theoretical and Computational Chemistry and its Applications" dell'ICCSA2018- 18th International Conference on Computational Science and Applications, Melbourne (Australia), 02-05 Luglio 2018 (membro Scientific Organizing Committee).

2017: Workshop "Chemistry and Materials Sciences and Technologies" dell'ICCSA2017- 17th International Conference on Computational Science and Applications, Trieste (Italia), 03-06 Luglio 2017(membro Scientific Organizing Committee).

2017: XIV International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS2017) Trieste (Italia), 03-06 Luglio 2017(membro Scientific Organizing Committee).

Organizzatore scientifico e locale della scuola di dottorato "School on Open Science Cloud", Perugia, 5-9 Giugno 2017 (http://fisgeo.unipg.it/ sosc17/index.html) parte del dottorato Europeo "European Joint Doctorate on TCCM (ITN-EJD-TCCM)" (membro Scientific Organizing Committee e Local Organizing Committee).

2016: Workshop "Chemistry and Materials Sciences and Technologies" dell'ICCSA2016- 16th International Conference on Computational Science and Applications, Beijing (Cina), 04-07 Luglio 2016 (membro Scientific Organizing Committee).

2015: Organizzazione del Training event: “Tools for e-learning and e-Assessment: Glorep and EOL”, Perugia (Italia) 14-15 Settembre 2015

2015: Workshop “Chemistry and Materials Sciences and Technologies” dell’ICCSA2015- 15th International Conference on Computational Science and Applications, Banff (Canada), 22-25 Giugno 2015 (membro Scientific Organizing Committee).

2012: 7th International Intensive Course European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (EU-TCCM) presso il Dipartimento di Matematica e Informatica dell’Università di Perugia, (Italia) 1-30 settembre 2012 (membro Scientific Organizing Committee e Local Organizing Committee).

2004: ICCSA 2004 “International Conference in Computational Science and its Applications “, Assisi (Italia) 14-17 maggio 2004 (membro Local Organizing Committee).

2002: 4th European Conference on Computational Chemistry (EUCO-CC4), La Cittadella , Assisi (Italia), 1-6 settembre 2002 (membro Local Organizing Committee).

Capacità e competenze tecniche con computer, attrezzature specifiche, macchinari, ecc.	Sistemi Operativi: Ottima conoscenza di sistemi operativi Linux, Windows e Mac OS. Software: Ottima conoscenza di programmi di Microsoft Office. Ottima conoscenza di programmi di Dinamica Molecolare (DL_PoLY, Gromacs). Buona conoscenza dei programmi Gaussian, Orca. Ottima conoscenza dei linguaggi di Programmazione: Fortran, C, $C^{+}+$ e buona conoscenza del Python.
Patente o patenti	Patente di guida B. Brevetto sub Open Water Diver
Ulteriore Informazioni	Astensione obbligatoria per maternità per il periodo dal 08.06.2017 al 08.11.2017

La sottoscritta **Maria Noelia Faginas Lago** 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. La sottoscritta 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. La sottoscritta 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, 20 novembre 2024

Place and date

Name Surname