

**FORMATO EUROPEO
PER IL CURRICULUM
VITAE**



INFORMAZIONI PERSONALI

| | |
|-----------------|--|
| Nome | FAGINAS LAGO, MARIA NOELIA |
| Indirizzo | VIA ABRUZZO 14, 06122- PERUGIA |
| Telefono | 3491937261 |
| Fax | |
| E-mail | noelia.faginaslago@unipg.it |
| Nazionalità | Spagnola |
| Data di nascita | 17 LUGLIO 1975 |

ESPERIENZA LAVORATIVA

| | |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Nome e indirizzo del datore di Lavoro • Tipo di azienda o settore • Tipo di impiego | <p>Dal 08/07/2019 – oggi</p> <p>Master-up srl (www.master-up.it) - Strada vicinale Sperandio, 15- Perugia</p> <p>Sviluppo di strumenti computazionali per approcci astrochimici Ricercatore- Supervisore scientifico.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>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.</p> |

ESPERIENZA LAVORATIVA PRESSO UNIVERSITÀ ITALIANE

| | |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Nome e indirizzo del datore di lavoro • Tipo di azienda o settore • Tipo di impiego | <p>06/07/2018 – 05/07/2019</p> <p>Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia</p> <p>Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie Ricercatore universitario a t.d.- Ricercatore a t.d - t. pieno (art.24 c.3-a L. 240/10)</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Proroga del contratto sotto riportato (per i dettagli vedi sotto)</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Nome e indirizzo del datore di Lavoro • Tipo di azienda o settore • Tipo di impiego | <p>06/07/2015 – 05/07/2018</p> <p>Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia</p> <p>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)</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>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</p> |

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)
 - Nome e indirizzo del datore di Lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
 - Principali mansioni e responsabilità

01/01/2014 – 05/07/2015 **(18 mesi)**
 Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia

 Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
 Assegnista di Ricerca (rinnovo)
 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)
 - Nome e indirizzo del datore di Lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
 - Principali mansioni e responsabilità

01/01/2012– 31/12/2013 **(24 mesi)**
 Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia

 Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie
 Assegnista di Ricerca
 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)
 - Nome e indirizzo del datore di Lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
 - Principali mansioni e responsabilità

01/01/2011 – 31/12/2011 **(12 mesi)**
 Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia

 Dipartimento di Chimica
 Collaborazione coordinata continuativa (co.co.co)
 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)
 - Nome e indirizzo del datore di Lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
 - Principali mansioni e responsabilità

01/02/2009 – 31/12/2010 **(10 mesi)**
 Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia

 Dipartimento di Chimica
 Collaborazione coordinata continuativa (co.co.co)
 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)
 - Nome e indirizzo del datore di Lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
 - Principali mansioni e responsabilità

01/12/2002 – 31/01/2009 **(74 mesi)**
 Università degli Studi di Perugia- P.zza dell'Università, 1- Perugia

 Dipartimento di Chimica
 Assegnista di Ricerca
 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 RTDA)

- 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

Dal 2006-2016 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).

| | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Nome e indirizzo del datore di Lavoro •Tipo di azienda o settore •Tipo di impiego •Principali mansioni e responsabilità | <p>ottobre-dicembre 2018 Master-up srl, Via Elce di Sotto 8, Perugia Prestazione di lavoro autonomo occasionale Gestione scientifica e amministrativa dell'organizzazione del congresso EUCCO2019</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Nome e indirizzo del datore di Lavoro •Tipo di azienda o settore •Tipo di impiego •Principali mansioni e responsabilità | <p>26 settembre-05 dicembre 2016 Master-up srl, Via Elce di Sotto 8, Perugia Prestazione di lavoro autonomo occasionale Gestione e organizzazione scuola "Open Science Cloud" dal 04 al 10 giugno 2017, Perugia</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Nome e indirizzo del datore di Lavoro •Tipo di azienda o settore •Tipo di impiego •Principali mansioni e responsabilità | <p>10-18 maggio 2012 Master-up srl, Via Elce di Sotto 8, Perugia Prestazione di lavoro autonomo occasionale Gestione segreteria e gestione spazi per lo svolgimento della conferenza PM2012</p> |

- Date (da – a) 11-30 maggio 2011
- Nome e indirizzo del datore di Lavoro Master-up srl, Via Elce di Sotto 8, Perugia
- Tipo di azienda o settore Prestazione di lavoro autonomo occasionale
- Tipo di impiego
- 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, Via Elce di Sotto 8, Perugia
- 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, Via Elce di Sotto 8, Perugia
- Tipo di azienda o settore Collaborazione coordinata continuativa (co.co.co)
- Tipo di impiego Attività di analisi e valutazione di 4 prodotti virtuali relativi a misurazioni di spettroscopia UV, IR fiamma e titolazioni Acido-Base

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 Qualifica conseguita
- 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 communicate 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 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 Italianish 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 2^{as} 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 postdoctoral E" (BF103.163) presso il gruppo del Prof. Ernesto García Para, Facultad de Ciencias y Tecnología, 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 Científic 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

- | | |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>febbraio 2008</p> <p>Short Term Scientific Mission (COST-STSM-D37-03472) presso il gruppo del Prof. Fermin Huarte-Larrañaga, Parc Cientific de Barcelona, (Spagna).</p> <p>Titolo del progetto: Implementation of a Semiclassical- Initial Value Representation (SC- IVR) program in the Grid environment to calculate atom-diatom rate coefficients and compare with MultiConfigurational Time Dependent Hartree (MCTDH) results</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Ricerca Scientifica</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>novembre 2006-dicembre 2006</p> <p>Short Term Scientific Mission (COST-STSM-D37-02415) presso il gruppo del Prof. Ernesto García Para, Departamento de Química Física, Universidad Pais Vasco, Vitoria (Spagna).</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Ricerca Scientifica</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>aprile 2003- luglio 2003</p> <p>Soggiorno di studio per collaborazione scientifica presso il gruppo del Prof. Xavier Guiménez, (Universitat de Barcelona), Barcelona (Spagna).</p> <p>Tema di ricerca: Calcoli delle costanti di velocità per reazioni elementari in fase gassosa usando metodi semiclassici moderni e dinamica delle reazioni chimiche.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Ricerca Scientifica</p> |

ABILITAZIONI

- | | |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • Anno • Tipo | <p>2017 (Tornata 2016)</p> <p>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 12/04/2023).</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anno • Tipo | <p>2017 (Tornata 2016)</p> <p>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), con validità dal 10/04/2017 al 10/04/2023.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anno • Tipo | <p>2017 (Tornata 2016)</p> <p>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 28/03/2023.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Tipo | <p>2006 – ad oggi</p> <p>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).</p> |

RICONOSCIMENTI PER L'ATTIVITÀ SCIENTIFICA

- **Attività editoriale**

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

Editore della rivista elettronica Virtual Innovation Research Teaching & Learning” journal, ISSN: 2279-8773, <http://www.hpc.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm>

È membro dell'Editorial Board della Newsletters dell'associazione ECTN-A (<http://ectn-assoc.cpe.fr/news/index.htm>)

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) 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) 01-05 Luglio 2019
- Descrizione Premio per l'organizzazione del workshop "Theoretical Chemistry and Computational applications" TCCA 2019 con il leadership certificate "ICCSA2019 - 19th International Conference on Computational Science and Applications San Pietroburgo (Russia).

- Date (da – a) Aprile 2018 ad oggi
- Descrizione Membro dell'Amministrative Council (AC) della associazione europea "European Chemistry Thematic Network" (<http://ectn.eu/about-us/administrative-council/>)

- 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 oggi
- 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
- Tipo Affiliazione alla Società Chimica Italiana (SCI) dal 2009. Divisione Chimica Teorica e Computazionale

- Date (da – a) 28/03/2007– 2018
- Tipo 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, opportunamente 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- presente
- Tipologia L'attività di ricerca è comprovata da 85 pubblicazioni scientifiche (di cui 2 inviate per la stampa e 2 in fase finale di preparazione); prodotti censiti da WOS: 71, Scopus: 70. In 46 pubblicazioni la sottoscritta è primo autore, ultimo autore e/o autore di riferimento.

Descrizione

Indici bibliometrici h-index 18, n° citazioni WOS (all databases): 702; n° citazioni scopus: 832; Google Scholar: 890 (citazione risultanti alla data del 26/08/2019); per ogni rivista si riportano impact factor (IF) e Scimago ranking SJR- 2018.

Lista delle Pubblicazioni

1. Yusuf Bramastya Apriliyanto, Stefano Battaglia, Stefano Evangelisti, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), Andrea Lombardi, Thierry Leininger
Graphene *Nano-Cones*; Carbon, in preparazione (2019).
2. Yusuf Bramastya Apriliyanto, Noelia Faginas Lago (corresponding author), Andrea Lombardi, Stefano Evangelisti, Massimiliano Bartolomei, Thierry Leininger, and Fernando Pirani;
Molecular Simulations of CO₂/N₂/H₂O Gaseous Mixture Separation in Multilayer Graphitryne Membranes; Journal Physical Chemistry C, in preparazione (2019).
3. S. Battaglia, S. Evangelisti, Noelia Faginas Lago (corresponding author), Thierry Leininger, F. Pirani
A Novel Intermolecular Potential to Describe the Interaction Between the Azide Anion

- and Carbon Nanotubes*; Diamond & Related Materials inviato in data 12 luglio 2019, richiesta revisione 12 agosto 2019.
4. 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; inviato al journal The Journal of Physical Chemistry C(in data 07 agosto 2019).
 5. 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))
 6. S. Battaglia, D. Bouet, A. Lecoq, S. Evangelisti, Noelia Faginas Lago, Thierry Leininger, A. Lombardi
Distributed Gaussian Orbitals for Molecular Calculations: Application to Simple Systems Molecular Physics 1-13, (2019) DOI:10.1080/00268976.2019.1615646 (IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.571 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.64 (Data di pubblicazione: 23 maggio 2019))
 7. M. Rosi, D. Skouteris, N. Balucani, C. Nappi, Noelia Faginas Lago, L. Pacifici, S. Falcinelli, 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 (IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.782 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=1.02 (Data di pubblicazione: 14 maggio 2019))
 8. S. Battaglia, Noelia Faginas Lago (corresponding author), Thierry Leininger, 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
 9. Dimitrios Skouteris, Nadia Balucani, Cecilia Ceccarelli, Noelia Faginas Lago, Claudio 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 Reports, 2018) =5.231 Numero di citazioni: 3 ISI-WoS; 4 Scopus; 6 GoogleScholar; SJR=2.42
 10. Andrea Lombardi, Noelia Faginas-Lago, Vincenzo Aquilanti
The Invariance Approach to Structure and Dynamics: Classical Hyperspherical Coordinates
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 Citation Reports, 2018) =3.782; Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar (Data di pubblicazione: 29 giugno 2019); SJR=0.28
 11. 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 IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =3.782 Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.28 (Data di pubblicazione: 29 giugno 2019)
 12. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), Yusuf Bramastya Apriyianto, Andrea Lombardi
Molecular Simulations of CO₂/N₂/H₂O Gaseous Mixture Separation in Graphitryne 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 (IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) = Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.28 (Data di pubblicazione: 29 giugno 2019))
13. 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](https://doi.org/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
14. 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
15. S. Battaglia, Hai-Anh Le, Gian Luigi Bendazzoli, Noelia Faginas Lago, Thierry Leininger, Stefano Evangelisti
A theoretical study on cyclacenes: Analytical tight-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
16. 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-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
17. 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](https://doi.org/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
18. 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_44. Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 2 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28
19. 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
20. 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
21. 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
22. 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
23. 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/mnras/lsx068 IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =5.231 Numero di citazioni: 10 ISI-WoS; 11 Scopus; 14 GoogleScholar; SJR=2.65
24. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), Alberti 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
25. 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](https://doi.org/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
26. 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
27. 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)
 V I R T & L - C O M M 1 0 . 2 0 1 6 . 7 , 2 0 1 6 I S S N : 2 2 7 9 - 8 7 7 3 <<http://services.chm.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/15252>>
28. Margarita Albertí, Noelia Faginas Lago, Antonio Laganà
The selective role of multipolar interaction in the formation of CH₄ and CO₂ clathrate hydrates
 V I R T & L - C O M M 1 0 . 2 0 1 6 . 2 , 2 0 1 6 I S S N : 2 2 7 9 - 8 7 7 3 <<http://services.chm.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/149>>
29. 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
30. 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](https://doi.org/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
31. 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 & Materials Sciences and Technologies) ICCSA 2016, Part I, LNCS 9786, 296-308 DOI: [10.1007/978-3-319-42085-1_23](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42085-1_23) (2016). Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28
32. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42085-1_6) (2016). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.28
33. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42085-1_20) (2016). Numero di citazioni: 1 ISI-WoS; 2 Scopus; 3 GoogleScholar; SJR=0.28
 34. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42085-1_10) (2016). Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 2 Scopus; 2 GoogleScholar; SJR=0.28
 35. 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](https://doi.org/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
 36. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42085-1_19) (2016). Numero di citazioni: 5 ISI-WoS; 5 Scopus; 6 GoogleScholar; SJR=0.28N.
 37. N.Faginas Lago
Lecture - Management of self evaluation sessions for ATS and NTC.
 V I R T & L - C O M M , [S . I .] , j a n . 2 0 1 6 . I S S N 2 2 7 9 - 8 7 7 3 . <http://www.hpc.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/102/99>
 38. Noelia Faginas-Lago, O. Gervasi, S. Tasso
Tools for e-Learning and e-Assessment: Glorep and EOL.
 V I R T & L - C O M M , [S . I .] , j a n . 2 0 1 6 . I S S N 2 2 7 9 - 8 7 7 3 . <http://www.hpc.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm/article/view/101>.
 39. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-21407-8_28) (2015). Numero di citazioni: 2 ISI-WoS; 1 Scopus; 1 GoogleScholar; SJR=0.28
 40. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-21407-8_26) (2015). Numero di citazioni: 7 ISI-WoS; 6 Scopus; 6 GoogleScholar; SJR=0.28
 41. 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](https://doi.org/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
 42. 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](https://doi.org/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
 43. 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](https://doi.org/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
44. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), M. Alberti, 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](https://doi.org/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
 45. Noelia Faginas-Lago (corresponding author), M. Alberti, 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-09144-0_40)(2014). Numero di citazioni: 10 ISI-WoS; 10 Scopus; 11 GoogleScholar; SJR=0.28
 46. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-319-09144-0_43) (2014).Numero di citazioni: 4 ISI-WoS; 5 Scopus; 5 GoogleScholar; SJR=0.28
 47. Bin Yeamin, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), M. Alberti, I. G. Cuesta, J. Sánchez-Marín, A. M. J. Sánchez de Merás
Multi-scale Theoretical Investigation of Molecular Hydrogen Adsorption over Graphene: Coronene As a Case Study
RSC Advances 4, 54447–54453 DOI: [10.1039/C4RA08487J](https://doi.org/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
 48. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-642-39643-4_2) (2013)
 Numero di citazioni: 17 ISI-WoS; 15 Scopus; 20 GoogleScholar; SJR=0.28
 49. 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](https://doi.org/10.1007/978-3-642-39637-3_6) (2013)
 Numero di citazioni: 27 ISI-WoS; 29 Scopus; 28 GoogleScholar; SJR=0.28
 50. 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
 51. M. Alberti, Noelia Faginas Lago
Competitive solvation in the $K^+-(C_6H_6)_n-(H_2O)_m$ ($n = 1-4$; $m = 1-6$) aggregates
European Physical Journal D (Atomic, Molecular, Optical & Plasma Physics) 1, 67-73 DOI:[110.1140/epjd/e2013-30753-x](https://doi.org/10.1140/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
 52. Noelia Faginas -Lago, M. Alberti, A. Laganà, A. Lombardi
Water $(H_2O)_m$ or benzene $(C_6H_6)_n$ 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
 53. L. Pacifici, M. Verdicchio, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), A. Lombardi, A. Costantini
A High-Level Ab Initio Study of the N_2+N_2 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
 54. 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
55. M. Alberti, 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
56. 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
57. M. Alberti, 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
58. 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
59. M. Alberti, 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
60. 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
61. 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
62. 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
63. S. Pallottelli, S. Tasso, N. Pannacci, 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
64. 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
65. Costantini, Noelia Faginas-Lago, A. Laganà and F. Huarte-Larrañaga
A Grid Implementation of Direct Quantum Calculations of Rate Coefficients
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

66. 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
67. Laganà, C. Manuali, Noelia Faginas Lago, O. Gervasi, S. Crocchianti, A. Riganeli, 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
68. M. Paolantoni, Noelia Faginas-Lago, M. Alberti, A. Laganà
Tetrahedral ordering in water: Raman profiles and their temperature dependence
Journal of Physical Chemistry A 113, 15100-15105 DOI:10.1021/jp9052083 (2009). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =2.641 Numero di citazioni: 47 ISI-WoS; 49 Scopus; 60 GoogleScholar; SJR=0.97
69. A. Costantini, Noelia Faginas-Lago (corresponding author), A. Laganà and F. Huarte-Larrañaga
A Grid Implementation of Direct Semiclassical Calculations of Rate Coefficients
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
70. 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
71. A. Laganà, Noelia Faginas Lago, S. Rampino, F. Huarte-Larrañaga, E. Garcia
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
72. 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
73. 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
74. 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
75. 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](https://doi.org/10.1007/11751540_77) (2006). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.28
76. 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](https://doi.org/10.1201/9780429070655-73) (2006). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 0 Scopus; 0 GoogleScholar; SJR=0.23
77. 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
78. 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](https://doi.org/10.1063/1.2345363) (2006).
 Numero di citazioni: 8 ISI-WoS; 17 Scopus; 18 GoogleScholar; SJR=1.16
79. 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](https://doi.org/10.1063/1.1941652) (2005). Numero di citazioni: 0 ISI-WoS; 5 Scopus; 5 GoogleScholar; SRJ=0.18
80. 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](https://doi.org/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
81. 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](https://doi.org/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
82. Noelia Faginas Lago, A. Laganà
Foreword
 Future Generation Computer Systems 20, 701-702 DOI:[10.1016/j.future.2003.11.014](https://doi.org/10.1016/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
83. 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](https://doi.org/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
84. 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](https://doi.org/10.1135/cccc20030307) (2003). IF della rivista (Journal of Citation Reports, 2018) =1.041 Numero di citazioni: 11 ISI-WoS; 15 Scopus; 22 GoogleScholar
85. 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**

1. 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 Graphtriylene Membranes: A molecular dynamics study"

2. 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).
4. Giugno 2014, Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia, Spagna. "Introduction to Molecular Dynamics".
5. Ottobre 2009, Departament de Química Física, Universitat de Barcelona, (Spagna). "EGEEIII - Enabling Grids for E-Science".

CONGRESSI

- Invited talks:

1. 12th Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA-2020) che avrà luogo in Vigo, 23-25 giugno 2020.
2. 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"
4. 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". (invited contrinution).
5. 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)

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. ICCSA 2017 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, University of Trieste (Italia) 3-6 luglio 2017, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi, F. Palazzetti, Acetone-water mixtures: Molecular Dynamics using a semiempirical intermolecular potential.
5. 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.
6. 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.
 7. ICCSA 2016 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, Beijing (China) 04 luglio -07 luglio 2016, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi, Acetone clusters molecular dynamics using a semiempirical intermolecular potential
 8. EUCOCC10, 10th European Conference on Computational Chemistry, Fulda (Germania), 31 agosto- 3 settembre 2015, N. Faginas-Lago, Multilayer Hydrogen Adsorption on Graphene from Multi- scale Simulation Modelling
 9. 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 intermolecular potential
 10. 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.
 11. 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.
 12. 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
 13. 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⁺?
 14. 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
 15. 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-methylacetamide and carbon dioxide dimers
 16. Theory, Experiments and Modelling of Chemical Processes, Dynamics and molecular interactions, Bologna, (Italia) 29 novembre 2012, N. Faginas-Lago, A. Laganà, A molecular dynamics study of hydrogen adsorption in carbon nanotubes
 17. EC₂E₂N₂: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference, Utrecht, (Paesi Bassi), 4-6 aprile 2013, N. Faginas-Lago, W03-Sustainable Entrepreneurship
 18. 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
 19. XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Lecce (Italia) 11-16 settembre 2011, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, NMA in aqueous solution using a portable intermolecular potential
 20. 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
 21. XXX Convegno Interregionale delle Sezione Toscana Umbria Marche Abruzzo

- della Società Chimica Italiana TUMA, Perugia (Italia) 30 giugno – 1 luglio 2011, N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, Similarities between the $K-C_6F_6$ and the $K^+-C_6F_6$ aggregates
22. 1st Phys4Entry Review: Molecular Dynamics on Earth Atmosphere, Barcelona (Spagna), 2-3 giugno 2011, N. Faginas-Lago, QCT calculations for CO_2-CO_2
 23. $EC_2E_2N_2$: 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
 24. $EC_2E_2N_2$: 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
 25. 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 $N + N_2$
 26. $EC_2E_2N_2$: European Chemistry and Chemical Engineering Education Network, Annual Conference 2008, Helsinki (Finlandia), 14-17 maggio 2008, N. Faginas-Lago, Implementation of the new questions inside the Computational Chemistry 4 database inside EChemTest[®] Group Leaders' Meeting
 27. International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2006), Corfù (Grecia), 25-20 settembre 2007, N. Faginas-lago, A. Laganà, Structural order in water: comparison between the spectral analysis of Raman data and molecular dynamics results.
 28. Action D26: Integrative Computational Chemistry, Evaluation Conference and Management Committee Meeting, Palermo- Sicilia (Italia), marzo 2007, N. Faginas-lago, A. Laganà, A molecular dynamics study of Ion permeability through molecular pores.
 29. 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 $N + N_2$ rate coefficient.
 30. VI Convegno nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale GICC, San Servolo-Venezia (Italia), 18-21 dicembre 2006, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Implementazione parallela di algoritmi semiclassici per il calcolo delle costanti di velocità per la reazione $N + N_2$.
 31. 6th European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC6), Tàle (Slovacchia), 3-7 settembre 2006, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Quantum vs semiclassical dynamics approaches from highly symmetric to asymmetric reactions
 32. ESCAMPIG XVIII 18th Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics in Ionized Gases, Lecce (Italia), 12-16 luglio 2006, N. Faginas-Lago, A. Laganà, From classical to reduced quantum $N + N_2$ reaction: rate coefficients and cross sections.
 33. 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 $N + N_2$ reaction: Quasiclassical, Quantum and Semiclassical calculations.
 34. ICCSA 2005 -Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, Singapore (Singapore), 9-12 maggio 2005, N. Faginas-Lago, A. Laganà, E. García, X. Guimenez, Thermal rate coefficients for the $N + N_2$ reaction: Quasiclassical, Quantum and Semiclassical calculations.
 35. 5th European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC5), La monde Les Maures, Hyeres (Francia), 15-20 giugno 2004, N. Faginas-Lago, A. Laganà, A comparison of SC-IVR and exact quantum collinear atom diatom transition probabilities for mixed reactive and non reactive regimes.
 36. 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.
37. ICCSA 2003 - Workshop on Chemistry and Molecular & Materials Sciences and Technologies, San Pietroburgo (Russia), 2-4 giugno 2003, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Initial value Semiclassical approaches to reactive and non reactive transition probabilities.
 38. COST-European Cooperation in the field of scientific and technical research, Action D23, Budapest (Hungary), giugno 2003, N. Faginas-Lago, Accurate metacomputer quantum mechanical studies of the structure, dynamics and spectroscopy of reactive systems.
 39. 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.
 40. 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 a congressi nazionali e internazionali personalmente presentati)

1. 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"
2. 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.
3. 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 experimental and theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis.
4. 6th EuCheMS Chemistry Congress, Siviglia (Spagna) 11-15 settembre 2016, N. Balucani, D. Stranges, D. Skouteris, N. Faginas-Lago, L. Pacifici, S. Falcinelli, M. Rosi, An experimental and theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis.
5. 1st Italian Workshop on Astrochemistry Astronomical Complex Organic Molecules in Different 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.
6. 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.
7. Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemist WATOC 2011, Santiago de Compostela (Spagna), 16-22 luglio 2011, N. Faginas-Lago, Molecular dynamics of NMA-NMA and NMA-H₂O aggregates using a portable intermolecular potential.
8. Il 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.

9. XXXIX Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Stresa (Italia) 20-24 settembre 2010, N. Faginas-Lago, A. Laganà, NMA in aqueous solution with intermolecular potentials.
10. 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.
11. 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.
12. 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 semiclassical dynamics.
13. 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.
14. 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.
15. 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_IVR methods: Grid applications
16. MOLEC XVI European Conference on Dynamics of Molecular Systems, Levico Terme- Trento (Italia), 11-15 settembre 2006, N. Faginas-Lago, E. García, A. Laganà, Semiclassical and Quantum Reduce Approaches for N + N₂ reaction: rate coefficients and cross sections
17. CCP6 Workshop “Semiclassical and Other methods for Understanding Molecular Collisions 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
18. 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
19. 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.
20. 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.
21. 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.
22. 4th European Conference on Computational Chemistry (EUCC-CC4), La Cittadella, Assisi (Italia), 1-6 settembre 2002, N. Faginas-Lago, A.

Riganelli, A. Laganà, Semiclassical State to State probabilities for a model atom diatom system.

23. XIX International Symposium on Molecular Beams, Università di La Sapienza, Roma (Italia), 3-8 giugno 2001, A. Laganà , N. Fagnas-Lago, A. Riganelli, G. Ferraro, An approach to reactive scattering based on non orthogonal coordinates.
24. VIII International Symposium on Molecular Beams, Arcachon (France), giugno 2000.

- **in qualità di partecipante meeting/workshop:** (E-learning e internazionalizzazione della didattica)

1. Partecipazione ECTN General Assembly, Cracovia (Polonia) 11-14 aprile 2019.
2. Partecipazione Virtual Education Community Meeting, Cracovia (Polonia) 11 aprile 2019.
3. 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
4. Partecipazione Training event: “ Deploying EchemTest exams with the new Platform”, Praga 18-22 aprile 2018.
5. Partecipazione ECTN General Assembly, Praga 21-22 aprile 2018.
6. Partecipazione Training event: “ Deploying EchemTest exams with the new Platform”, Valletta (Malta) 02-03 aprile 2017.
7. Partecipazione ECTN General Assembly, Valletta (Malta) 02-04 aprile 2017.
8. Preparazione del nuovo progetto Europeo “Erasmus Mundus Joint Master Degree” con lo scopo di rinnovare il “Theoretical Chemistry and Computational Modeling” master in corso presso 7 Università Europee (https://tccm.qui.uam.es/?page_id=1419)
9. Partecipazione al Tech Meeting del tour [ERG Re-generation Challenge](#), la business 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.
10. Partecipazione al Mid Term Meeting EJD-TCCM come supervisor di due studenti di dottorato Europei presso il programma ITN- European Joint Doctorate (EJD-TCCM) 15-17 dicembre 2016 Madrid (Spagna).
11. Partecipazione al convegno “Storage Energie Rinnovabili” presso il Dipartimento di Ingegneria Civile ed Ambientale dell'Università degli Studi di Perugia, (Italia) 11 novembre 2016.
12. Partecipazione EchemTest-Training event: “Deploying EchemTest exams with the new Platform”, Perugia (Italia) 15-16 settembre 2016.
13. 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).
14. 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.
15. Partecipazione al meeting “ECTN General Assembly 2016” rappresentando il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia all'interno della l'Associazione ECTNA. Inoltre, come Group leader delle librerie di “Computational Chemistry level 4” ho presentato la nuova piattaforma EOL per i test elettronici in Chimica, 24-26 aprile 2016, Gdansk (Polonia).
16. 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).
17. 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).
 18. 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).
 19. Partecipazione Training event: “ Tools for e-learning and e-Assessment: Glorep and EOL”, Perugia (Italia) 15-16 settembre 2016
 20. 8-29 maggio 2013: Partecipazione al meeting “*GLorep-EoL presentation and developments*” all’interno della collaborazione scientifica in corso con Aristotle University of Thessaloniki.
 21. 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*” .
 22. Symposium “Chemical Physics of Low Temperature Plasmas”, Roma (Italia), 31 gennaio -1 febbraio 2011
 23. Advanced Research Workshop on the Dynamics of Elementary Reactions (NATO), Balatonfoeldvar (Ungheria), settembre 2003.

COLLABORAZIONI SCIENTIFICHE NAZIONALI O INTERNAZIONALI

- | | |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>2006 - ad oggi</p> <p>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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Referente italiano, ricerca</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>2010 - ad 2018</p> <p>Prof.ssa Margarita Albertí (Universitat de Barcelona), Barcelona (Spagna). Argomento: Molecular Dynamics Study: molecules with a peptide group.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Referente italiano, ricerca</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>2015 - ad oggi</p> <p>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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Referente italiano, ricerca</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>2011 - ad oggi</p> <p>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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Referente italiano, ricerca</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>2003 - ad oggi</p> <p>Prof. Ernesto García Para (Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea Química Física), Basque Country, (Spagna). Argomento: Implementation of a semiclassical code on the</p> |

- EGEE GRID.
- Principali mansioni e responsabilità Referente italiano, ricerca
 - Date (da – a) 2017 - ad oggi
 - Descrizione Collaborazione con il gruppo di Chimica Quantisca (Universidade Vigo, Spagna) Prof. Hermida e Prof. Marcos Mandado. Argomento: Analisi e sviluppo di modelli per le interazione tra le diossine e il grafene.
 - Principali mansioni e responsabilità Referente italiano, ricerca

ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- 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 - 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) 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 de 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 obiettivo 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) 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 - 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) 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.

| | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Titolo: "Studio teorico del legame peptidico attraverso tecniche di dinamica molecolare e sviluppo di potenziali in armoniche sferiche e ipersferiche". Responsabile scientifico del progetto</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>01 novembre 2015- 31 dicembre 2018 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).</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>2009 - 2015 7th European Mundus Joint Master Degrees "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM) Master</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Co-responsabile scientifico e coordinatore del progetto all'interno del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie.</p> |
| <p>PARTECIPAZIONE A PROGETTI SCIENTIFICI FINANZIATI (PARTECIPANTE ALL'UNITÀ OPERATIVA)</p> | |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>23-09-2015 a 23-09-2019 SIR (Scientific Independence of young Researchers) 2014 dal titolo "ORCHID an integrated search of stereodynamical mechanisms on the ORigin of CHlral Discrimination by oriented molecular beams, synchrotron radiation, molecular dynamics and computational modeling", codice RBS114U3VF.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Partecipante all'Unità Operativa locale, Università degli Studi di Perugia</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date • Descrizione | <p>23 ottobre 2018 a 22 ottobre 2020 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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Partecipante all'Unità Operativa coordinata dalla Prof. ssa N. Balucani, Università degli Studi di Perugia</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date • Descrizione | <p>20 luglio 2015 a 31 maggio 2018 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</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | <p>Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. ssa P. Casavecchia, Università degli Studi di Perugia</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Descrizione | <p>10 luglio 2014 a 30 novembre 2016 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</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Principali mansioni e responsabilità | |

| | |
|--|---|
| | Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. ssa N. Balucani, Università degli Studi di Perugia |
| • Date (da – a) | 01 febbraio 2013 a 31 gennaio 2016 |
| • Descrizione | PRIN 2010/2011 prot. 2010ERFKXL_002. Titolo: Studi di frontiera in spettroscopia e dinamica molecolare: da sistemi molecolari semplici ad aggregati supramolecolari e materiali avanzati. |
| • Principali mansioni e responsabilità | Partecipante all'Unità Operativa coordinata dal Prof. P. Casavecchia, 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 5022 71-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_003. TITOLO:Dai processi elementari alla modellistica accurata di sistemi complessiPartecipante all'Unità. |
| 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 fisorción 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. (pagina 2 del progetto allegato)
- 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

- Date (da – a) 2006 -2010
 - Descrizione ARPA Umbria: Titolo progetto: Studi modellistico 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) 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_002
- 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_002
- 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_002. TITOLO: Studio di aggregati molecolari in condizioni controllate e dinamiche di reazione in fasci molecolari.
- 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

ATTIVITÀ DIDATTICA UNIVERSITARIA (NAZIONALE)

- Date (da – a) A.A 2018/2019
- Università Università degli Studi di Perugia
- Tipo di impiego Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale
- Principali mansioni e responsabilità Docente del corso di “ Dynamical 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 2018/2019
- Università Università degli studi di Perugia
- Tipo di impiego Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale
- Principali mansioni e responsabilità 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
- Principali mansioni e responsabilità 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
- Principali mansioni e responsabilità 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 A.A 2016/2017
- Università Università degli studi di Perugia
- Tipo di Impiego Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale
- Principali mansioni e responsabilità 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) 02-08-2016 ad 07-07-2019
- Università Università degli studi di Perugia

| | |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Tipo di impiego | Membro della Commissione per la Concessione del Nullaosta per l'iscrizione alla Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università di Perugia. |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2015/2016 Università degli studi di Perugia 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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego | <p>01.11.2015 ad oggi Università degli studi di Perugia 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</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2014/2015 Università degli studi di Perugia 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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>2013 – ad oggi Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli studi di Perugia Incaricato ufficiale, in qualità di responsabile, della supervisione dei test EchemTest® del Corso di Laurea Triennale in Chimica per il conseguimento del titolo EuroBachelor rilasciato dalla European Chemistry Tematic Network Association (preparazione dei test, somministrazione del test agli studenti, stesura del report finale).</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2008/2009 Università degli studi di Perugia 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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2008/2009 Università degli studi di Perugia 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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2007/2008 Università degli studi di Perugia 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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anni accademici <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2004/2005 Università degli studi di Perugia Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occasionale 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.</p> |

- Anni Accademici A.A. 2002/2003
- Università Università degli studi di Perugia
- Tipo di impiego Contratto per prestazione di lavoro autonomo di collaborazione occassionale
- Principale mansioni e responsabilità Attività di Tutorato ufficiale per il corso "Chimica Computazionale" (CHIM/03) della Laurea Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN.

**ATTIVITA DIDATTICA
UNIVERSITARIA (ESTERO)**

- Data 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

- Data 1-10 aprile 2019
- Università Universidade Vigo, Departamento de Química-Física, Vigo (Spagna)
- Tipo di impiego Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
- Principali mansioni e responsabilità Didattica e Ricerca

- Data 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

- Data 09 -18 aprile 2018
- Università Universidade Vigo, Departamento de Química-Física, Vigo (Spagna)
- Tipo di impiego Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
- Principali mansioni e responsabilità Didattica e Ricerca

- Data 20-22 settembre 2017
- Università Universidad de Valencia (Spagna).
- Tipo di impiego 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)".
- Principali mansioni e responsabilità

- Data 29 gennaio-04 febbraio 2017
- Università Universidade Autonoma de Madrid, (Spagna)
- Tipo di impiego Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.
- Principali mansioni e responsabilità Didattica e Ricerca

- Data 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

- Data 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

- Data 12-20 maggio 2016
- Università Universidad de la Rioja, Departamento de Química, Logroño (Spagna)
- Tipo di impiego Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.

| | |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>Didattica e Ricerca</p> <p>14-21 aprile 2016</p> <p>Universidade Autonoma de Madrid, (Spagna)</p> <p>Docenza ERASMUS + Mobility for Teaching.</p> <p>Didattica e Ricerca</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Data • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>9-10 settembre 2013</p> <p>Universidad Autonoma de Madrid (Spagna).</p> <p>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)".</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2005/2006</p> <p>Facultad de Ciencias y tecnologia, Universidad del País Vasco, Vitoria, Spagna</p> <p>Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale</p> <p>Docente del corso di "Físicquímica" nel CdL Ciencias Ambientales per 40 ore.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Date (da – a) • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>A.A 2004/2005</p> <p>Facultad de Ciencias y tecnologia, Universidad del País Vasco, Vitoria, Spagna</p> <p>Affidamento di insegnamento di didattica ufficiale</p> <p>Docente del corso di "Prácticas de Laboratorio de Ciencias Ambientales" nel CdL Ciencias Ambientales per 30 ore.</p> |

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

1. 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).
3. 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

| | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Data • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>16 ottobre 2018</p> <p>Université de Toulouse - Paul Sabatier (Francia)</p> <p>Membro di Giuria</p> <p>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.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Data | <p>31 ottobre 2012</p> |

| | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Università • Tipo di impiego • Principali mansioni e responsabilità | <p>Univesitat de Barcelona, Barcelona (Spagna)</p> <p>Membro di Giuria</p> <p>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 meccanici e quantistici multiconfigurazionali per lo studio delle reazioni chimiche.</p> |
|---|--|

MEMBRO DI COMMISSIONE DI ESAME

| | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Anni Accademici • Università <ul style="list-style-type: none"> • corso • corso di Laurea <ul style="list-style-type: none"> • incarico | <p>2018/2019; 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016; 2014/2015; 2013/2014; 2012/2013; 2010/2011; 2009/2010; 2008/2009; 2007/2008; 2006/2007</p> <p>Università degli Studi di Perugia</p> <p>Informatica chimica/Informatica</p> <p>Laurea in Chimica</p> <p>Membro effettivo 2018/2019; 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016</p> <p>Membro supplente 2014/2015; 2013/2014; 2012/2013; 2010/2011; 2009/2010; 2008/2009; 2007/2008; 2006/2007</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anni Accademici • Università <ul style="list-style-type: none"> • corso • corso di Laurea <ul style="list-style-type: none"> • incarico | <p>2018/2019; 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016; 2014/2015</p> <p>Università degli Studi di Perugia</p> <p>Atmospheric Chemistry</p> <p>Laurea in Chimica</p> <p>Membro supplente.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anni Accademici • Università <ul style="list-style-type: none"> • corso • corso di Laurea <ul style="list-style-type: none"> • incarico | <p>2018/2019; 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016; 2014/2015; 2013/2014; 2012/2013; 2010/2011; 2009/2010; 2008/2009; 2007/2008; 2006/2007</p> <p>Università degli Studi di Perugia</p> <p>Chimica al Calcolatore</p> <p>Laurea in Chimica</p> <p>Membro effettivo 2018/2019; 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016</p> <p>Membro supplente 2014/2015; 2013/2014; 2012/2013; 2010/2011; 2009/2010; 2008/2009; 2007/2008; 2006/2007</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anni Accademici • Università <ul style="list-style-type: none"> • corso • corso di Laurea <ul style="list-style-type: none"> • incarico | <p>2018/2019; 2017/2018</p> <p>Università degli Studi di Perugia</p> <p>Esperienze Professionali e verbalizzazione Stages</p> <p>Laurea Magistrale in Scienze Chimiche</p> <p>Membro effettivo.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anni Accademici • Università <ul style="list-style-type: none"> • corso • corso di Laurea <ul style="list-style-type: none"> • incarico | <p>2018/2019; 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016; 2014/2015; 2013/2014; 2012/2013; 2008/2009; 2004/2005; 2002/2003</p> <p>Università degli Studi di Perugia</p> <p>Computational Chemistry/Chimica Computazionale</p> <p>Laurea Magistrale in Scienze Chimiche</p> <p>Membro effettivo.</p> |
| <ul style="list-style-type: none"> • Anni Accademici • Università <ul style="list-style-type: none"> • corso • corso di Laurea <ul style="list-style-type: none"> • incarico | <p>2018/2019; 2017/2018</p> <p>Università degli Studi di Perugia</p> <p>Dynamics of Chemical Reactions and Statistical Mechanics</p> <p>Laurea Magistrale in Scienze Chimiche</p> <p>Membro effettivo.</p> |

- Anni Accademici 2018/2019; 2017/2018; 2015/2016; 2014/2015; 2013/2014; 2012/2013
 - Università Università degli Studi di Perugia
 - corso Theoretical Methods for Molecular Dynamics/Metodi Teorici per la Dinamica Molecolare.
 - corso di Laurea Laurea Magistrale in Scienze Chimiche
 - incarico Membro supplente.

 - Anni Accademici 2018/2019; 2017/2018
 - Università Università degli Studi di Perugia
 - corso Chimica Generale
 - corso di Laurea Laurea in Scienze Biologiche
 - incarico Membro effettivo.

 - Anni Accademici 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016
 - Università Università degli Studi di Perugia
 - corso Meccanismi e Dinamica delle Reazione Chimiche: Fondamenti Teorici
 - corso di Laurea Laurea Magistrale in Scienze Chimiche
 - Incarico Membro effettivo.

 - Anni Accademici 2015/2016; 2014/2015
 - Università Università degli Studi di Perugia
 - corso Chimica Generale e Inorganica
 - corso di Laurea Scienze della formazione primaria
 - incarico Membro effettivo.

 - Anni Accademici 2014/2015
 - Università Università degli Studi di Perugia
 - corso Chimica e Biochimica
 - corso di Laurea Laurea in Produzione Animali, Dipartimento di medicina veterinaria
 - incarico Membro effettivo.
-
- Anni Accademici 2009/2010; 2008/2009; 2007/2008
 - Università Università degli Studi di Perugia
 - corso Gestione in rete di basi di conoscenza molecolari
 - corso di Laurea CdL Specialistica in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN
 - incarico Membro effettivo.

 - Anni Accademici 2009/2010
 - Università Università degli Studi di Perugia
 - corso Modellistica dell'atmosfera
 - corso di Laurea Laurea Magistrale in Scienze Chimiche della Facoltà di SS.MM. FF. NN
 - incarico Membro supplente.

**SUPERVISORE DI TESI DI
DOTTORATO**

1. In corso - Dottorando: 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".

2. 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).
3. Dottorando: Carles Martí Aliod. (Università di Perugia in co-tutela con l'Université 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).
4. Dottorando: Stefano Battaglia. (Università di Perugia in co-tutela con l'Université 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'Université Paul-Sabatier (Francia).

SUPERVISORE DI TESI DI LAUREA MAGISTRALE

- Date (da - a) 2005 – ad oggi
- Università Università degli Studi di Perugia
- Dettagli Relatrice o co-relatrice di 7 tesi di Laurea Magistrale, come da elenco seguente:

1. 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"
2. 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"
3. 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".
5. 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" .
6. 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".
7. 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".

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

SUPERVISORE DI TESI DI LAUREA

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

1. A. 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 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.

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

Attività di gestione e organizzazione per MASTER-UP SRL:

1. 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 *Daniilo 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.

2. 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.

3. 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.

Attività in corso con la MASTER-UP

- Master-up attualmente gestisce e mantiene i servizi di mail&webmail di *EuCheMS* sui propri server privati.
- Attività di supporto all'esecuzione dell'attività analitica su matrice suolo e rifiuti con l'ARPA Umbria affidato dall'Agenzia Regionale per la Protezione Ambientale (ARPA)
- Rilevazione, raccolta ed elaborazione di dati sulle sorgenti d'inquinamento ambientali regionali al fine di aggiornare gli Inventari Regionali delle Emissioni (IRE) affidato dall'Agenzia Regionale per la Protezione Ambientale (ARPA)
- Progetto per l'attività di supporto all'esecuzione dei campionamenti alle emissioni e di attività analitica della matrice ARIA (aria-emissioni e aria-immissioni) con il Servizio Campionamento Emissioni del Laboratorio Multisito di ARPA Umbria affidato dall'Agenzia Regionale per la Protezione Ambientale (ARPA)

CAPACITÀ E COMPETENZE PERSONALI

Acquisite nel corso della vita e della carriera ma non necessariamente riconosciute da certificati e diplomi ufficiali.

| | |
|--|--|
| <p>MADRELINGUA</p> <p>ALTRE LINGUA</p> <ul style="list-style-type: none"> • Capacità di lettura • Capacità di scrittura • Capacità di espressione orale | <p>SPAGNOLA</p> <p>INGLESE</p> <p>Eccellente</p> <p>Eccellente</p> <p>Eccellente</p> <p>Italiano</p> <p>Eccellente</p> <p>Eccellente</p> <p>Eccellente</p> |
| <p>CAPACITÀ E COMPETENZE</p> <p>RELAZIONALI</p> <p><i>Vivere e lavorare con altre persone, in ambiente multiculturale, occupando posti in cui la comunicazione è importante e in situazioni in cui è essenziale lavorare in squadra (ad es. cultura e sport), ecc.</i></p> | <p>Collaborazioni scientifiche con il Prof. A. Laganà, Prof. M. Rosi, Prof. ssa N. Balucani e il Dr. A. Lombardi (Università degli Studi di Perugia), Dr. D. Skouteris (Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia) Prof. Fermin Huarte (UB, Barcelona, Spagna), Prof. Alfredo Sánchez de Merás e Prof. Jose Sánchez (Universitat Valencia, Valencia, Spagna), Dr. Y. Wang (Universidad Autonoma de Madrid e Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia), Madrid, (Spagna), Prof. F. Pirani (Università degli Studi di Perugia), Prof. M. Albertí (UB, Barcelona, Spagna), Prof. Sergio Vela (Universidad Autonoma de Madrid, Spagna). I risultati prodotti da queste collaborazioni sono illustrati nelle pubblicazioni scientifiche.</p> <p>Piu' di recente, ho stabilito collaborazioni con astronomi (Prof. S Viti, University College, London, UK; Prof. C. Ceccarelli, Université Grenoble Alpes, Grenoble, France; Cludio Codella e Linda Podio, INAF – Osservatorio di Arcetri, Firenze, Italia) su temi di astrochimica.</p> <p>Chair of the Session “Gentrack2” 17th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA2017), University of Trieste (Italia) 3-6 Luglio 2017</p> <p>Chair of the Session XIV INTERNATIONAL WORKSHOP ON QUANTUM REACTIVE SCATTERING (QRS 2017) University of Trieste (Italia) 3-6 Luglio 2017</p> <p>Tutore locale dello studente Mr. Jake Adam Huke Wilson durante il suo periodo di mobilità per ricerca all'interno del programma Erasmus Mundus Master Course (EMMC) in Theoretical Chemistry and Computational Modelling TCCM da gennaio ad aprile del 2016.</p> <p>Membro attivo da Settembre 2012 del <i>Virtual Education Community committee (VEC) standing committee meeting.</i></p> <p>Editore della rivista elettronica <i>Virtual Innovation Research Teaching & Learning</i> journal, ISSN: 2279-8773, http://www.hpc.unipg.it/ojs/index.php/virtlcomm</p> <p>È membro dell'Editorial Board della Newletters dell'associazione ECTN-A (http://ectn-assoc.cpe.fr/news/index.htm)</p> |
| <p>CAPACITÀ E COMPETENZE</p> <p>ORGANIZZATIVE</p> <p><i>Ad es. coordinamento e amministrazione di persone, progetti, bilanci; sul posto di lavoro, in attività di volontariato (ad es. cultura e sport), a casa, ecc.</i></p> | <p>La capacità e le competenze organizzative sono testimoniata dalla gestione scientifica e finanziaria dei progetti finanziati elencati precedentemente (ITN2014, ITN2018, EM-TCCM) ottenuti come responsabile di unità locale. Oltre alla gestione del finanziamento stesso, la sottoscritta ha personalmente coordinato il gruppo di ricerca.</p> <p>Inoltre, la sottoscritta ha anche partecipato al comitato <u>organizzatore dei seguenti eventi e congressi scientifici:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • 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 (EUCCO-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 (DI_PoLY, Gromacs).
- Buona conoscenza dei programmi Gaussian, Orca.

Ottima conoscenza dei linguaggi di Programmazione: Fortran, C, C++ e buona conoscenza del Python.

CAPACITÀ E COMPETENZE ARTISTICHE

Musica, scrittura, disegno ecc.

[Descrivere tali competenze e indicare dove sono state acquisite.]

ALTRE CAPACITÀ E COMPETENZE

Competenze non precedentemente indicate.

[Descrivere tali competenze e indicare dove sono state acquisite.]

PATENTE O PATENTI

Patente di guida B. Brevetto sub Open Water Diver

ULTERIORI INFORMAZIONI

- Astensione obbligatoria per maternità per il periodo dal 08.06.2017 al 08.11.2017

ALLEGATI

[Se del caso, enumerare gli allegati al CV.]

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

.....
(luogo e data)

Firma ¹

¹La firma è obbligatoria, pena la nullità della dichiarazione, e deve essere leggibile.