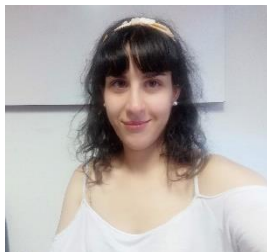



Silvia Alessandrini



Nazionalità: Italiana

Data di nascita: 07/05/1993

Sesso: Femminile

 **Cellulare** (+39) 3492906604

 **Indirizzo e-mail:** silvia.alessandrini@sns.it

 **Indirizzo:** Via A. Fioravanti 9, 40129 Bologna (Italia)

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Diploma di Perito Chimico Industriale

Istituto Tecnico Industriale Statale "Enrico Mattei" [01/09/2007 – 15/07/2012]

Indirizzo: Via L. Pacioli 22, 61029 Urbino (Italia)

Voto finale: 100/100 – **Livello EQF:** Livello 4 EQF

Laurea Triennale in Chimica e Chimica dei Materiali

Dipartimento di Chimica "Giacomo Ciamician", Alma Mater Studiorum - Università di Bologna [01/09/2012 – 10/12/2015]

Indirizzo: Via F. Selmi 2, 40126 Bologna (Italia)

Campi di studio: Scienze naturali, matematiche e statistiche: *Chimica*

Voto finale: 110/110 cum laude – **Livello EQF:** Livello 6 EQF

Tesi: Caratterizzazione Energetica e Strutturale di una molecola probiotica: la formammide e il suo dimero

Relatore: Professoressa C. Puzzarini

Laurea Magistrale in Chimica

(Curriculum B: Metodologie di Analisi e Caratterizzazione)

Dipartimento di Chimica "Giacomo Ciamician", Alma Mater Studiorum - Università di Bologna [16/12/2015 – 12/10/2017]

Indirizzo: Via F. Selmi 2, 40126 Bologna (Italia)

Campi di studio: Scienze naturali, matematiche e statistiche: *Chimica*

Voto finale: 110/110 cum laude – **Livello EQF:** Livello 7 EQF

Tesi: Spectroscopic Characterization of New Sulfur-containing Molecules for Astrochemical Purposes

Relatore: Professoressa C. Puzzarini Correlatori: Professor J. Gauss e Dr. Lorenzo Spada

Dottorato in "Methods and Models for Molecular Sciences"

Scuola Normale Superiore di Pisa [01/11/2017 – 12/05/2022]

Indirizzo: Piazza dei Cavalieri 7, 56126 Pisa (Italia)

Voto: Superato con lode – **Livello EQF:** Livello 8 EQF – **SSD:** CHIM/02

Tesi: Modelling Weak Interactions in the Gas Phase: From Rotational Spectroscopy to Reaction Rates Using Accurate Quantum-Chemical Approaches

Supervisore: Professoressa C. Puzzarini Co-supervisore: Professor V. Barone

Assegnista di ricerca

Scuola Normale Superiore di Pisa [10/01/2022 – 09/01/2023]

Indirizzo: Piazza dei Cavalieri 7, 56126 Pisa (Italia)

Tema: *Analisi teorico-computazionale di interazioni intermolecolari complesse all'interno del progetto "LCFA – Local charge flux analysis: a new scheme for the analysis of intermolecular interaction"* **SSD:** CHIM/02

Advisor: Dr. Sergio Rampino **Co-advisor:** Professor V. Barone

Durata: 1 anno

Assegnista di ricerca

Dipartimento di Chimica "Giacomo Ciamician", Alma Mater Studiorum - Università di Bologna [01/02/2023 – ad oggi]

Indirizzo: Via F. Selmi 2, 40126 Bologna (Italia)

Tema: *Studio computazionale della reattività in fase gassosa nel mezzo interstellare* **SSD:** CHIM/02

Advisor: Professoressa C. Puzzarini

Durata: 2 anni

COMPETENZE LINGUISTICHE

Lingua madre: **Italiano**

Altre lingue: **Inglese**

ASCOLTO	C2	LETTURA	C2	SCRITTURA	C1
PRODUZIONE ORALE		C1	INTERAZIONE ORALE		C1

COMPETENZE DIGITALI

Software

Software AutoCAD / Google suite (Gmail, Google Drive, Google Slide, Google Docs, Google Sheets, Google Forms, Google) / Pacchetto Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint)

Programmi di quantomeccanica

Elevata abilità nell'utilizzo di CFour e Gaussian16

Moderata abilità nell'utilizzo di MolPro, Turbomole e MESS

Programmi di Spettroscopia

PGOPHER / moduli SPFIT and SPCAT of H. Pickett / Virtual Multifrequency Spectrometer (VMS) - Moduli Comp e Rot

PUBBLICAZIONI (maggio 2022)

*Corresponding author; †Both authors contributed equally

1) S. Alessandrini and C. Puzzarini*, *Structural and Energetic Characterization of Prebiotic Molecules: The Case Study of Formamide and Its Dimer*. J. Phys. Chem. A, 120, 5257 (2016).

2) S. Alessandrini, J. Gauss and C. Puzzarini*, *Accuracy of Rotational Parameters Predicted by High Level Quantum-Chemical Calculations: Case Study of Sulfur-Containing Molecules of Astrochemical Interest*, J. Chem. Theory Comput., 14, 5360 (2018).

- 3) D. A. Obenchain, L. Spada, S. Alessandrini, S. Rampino, S. Herbers, N. Tasinato, M. Mendolicchio, P. Kraus, J. Gauss, C. Puzzarini, J. -U. Grabow*, V. Barone*, *Unveiling the Sulfur–Sulfur Bridge: Accurate Structural and Energetic Characterization of a Homochalcogen Intermolecular Bond*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, *57*, 15822 (2018).
- 4) J. Wang, L. Spada, J. Chen, S. Gao, S. Alessandrini, G. Feng*, C. Puzzarini*, Q. Gou*, J-U. Grabow, V. Barone*, *The Unexplored World of Cycloalkene–Water Complexes: Primary and Assisting Interactions Unraveled by Experimental and Computational Spectroscopy*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *58*, 13935 (2019).
- 5) S. Alessandrini*, V. Barone*, C. Puzzarini*, *Extension of the “Cheap” Composite Approach to Noncovalent Interactions: The jun-ChS Scheme*, *J. Chem. Theory Comput.*, *16*, 988 (2020).
- 6) S. Alessandrini*, V. Dell'Isola, L. Spada, V. Barone, C. Puzzarini*, *A Computational Journey in the CH₂O₂S Land: an Accurate Rotational and Ro-vibrational Analysis of the Sulfene Molecule and the O,S- and O,O-Monothiocarbonic Acids*, *Mol. Phys.*, *118*, e1766707 (2020)
- 7) C. Puzzarini*, L. Spada, S. Alessandrini, V. Barone, *The challenge of non-covalent interactions: theory meets experiment for reconciling accuracy and interpretation*, *J. Phys. Condens. Matter*, *32*, 343002 (2020)
- 8) J. Lei, S. Alessandrini, J. Chen, Y. Zheng, L. Spada*, Q. Gou*, C. Puzzarini, V. Barone*, *Rotational Spectroscopy Meets Quantum Chemistry for Analyzing Substituent Effects on Non-Covalent Interactions: The Case of the Trifluoroacetophenone-Water Complex*, *25*, 4899 (2020)
- 9) S. Alessandrini*, F. Tonolo, C. Puzzarini, *In search of phosphorus in astronomical environments: The reaction between the CP radical ($X^2\Sigma^+$) and methanimine*, *J. Chem. Phys.*, *154*, 054306 (2021)
- 10) V. Barone, S. Alessandrini, M. Biczysko, J. R. Cheeseman, D. C. Clary, A. B. McCoy, R. J. DiRisio, F. Neese, M. Melosso, C. Puzzarini*, *Computational molecular spectroscopy* *Nat. Rev. Methods Primers*, *1*, 38 (2021)
- 11) S. Alessandrini*, M. Melosso *Fate of the gas-phase reaction between oxirane and the CN radical in interstellar conditions*, *Front. Astron. Space Sci.*, *8*, 159 (2021)
- 12) S. Alessandrini*, M. Melosso, N. Jiang, L. Bizzocchi, L. Dore, C. Puzzarini *Conformational stability of cyclopropanecarboxaldehyde is ruled by vibrational effects*, *Mol. Phys.*, *119*, e1955988 (2021)
- 13) J. Lupi[†], S. Alessandrini[†], C. Puzzarini*, V. Barone* *junChS and junChS-F12 models: parameter-free efficient yet accurate composite schemes for energies and structures of non-covalent complexes*, *J. Chem. Theory and Comput.*, *17*, 6974 (2021)
- 14) L. Bizzocchi, S. Alessandrini, M. Melosso, V. M. Rivilla, C. Puzzarini* *Ab Initio Study of Fine and Hyperfine Interactions in Triplet POH*, *Molecules*, *27*, 302 (2022)
- 15) M. Melosso*, L. Bizzocchi, H. Gazzeh, F. Tonolo, J.-C. Guillemin, S. Alessandrini, V. M. Rivilla, L. Dore, V. Barone, C. Puzzarini*, *Gas-phase identification of (Z)-1,2-ethenediol, a key prebiotic intermediate in the formose reaction*, *Chem. Commun.*, *58*, 2570 (2022)
- 16) X. Li, L. Spada, S. Alessandrini, Y. Zheng, K. G. Lengsfeld, J.-U. Grabow, G. Feng*, C. Puzzarini, V. Barone*, *Stacked but not Stuck: Unveiling the Role of $\pi \rightarrow \pi^*$ Interactions with the Help of the Benzofuran–Formaldehyde Complex* *Angew. Chem. Int. Ed.*, *61*, 264 (2022)
- 17) F. Tamassia*, L. Bizzocchi*, M. Melosso*, M. A. Martin-Drumel, O. Pirali, A. P. Charmet, E. Canè, L. Dore, I. E Gordon, J.-C. Guillemin, B. M. Giuliano, P. Caselli, S. Alessandrini, V. Barone, C. Puzzarini, *Synchrotron-based far-infrared spectroscopy of HC₃N: Extended ro- vibrational analysis and new line list up to 3360 cm⁻¹*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat.*, *279*, 108044 (2022)
- 18) N. Jiang, M. Melosso*, L. Bizzocchi, S. Alessandrini, J.-C. Guillemin, L. Dore, C. Puzzarini*, *Spectroscopic and Computational Characterization of 2-Aza-1,3-butadiene, a Molecule of Astrochemical Significance*, *J. Phys. Chem. A*, *126*, 1881 (2022)

- 19) V. M. Rivilla*, L. Colzi, I. Jimenez-Serra, J. Martin-Pintado, A. Megias, M. Melosso, L. Bizzocchi, A. Lòpez-Gallifa, A. Martínez-Henares, S. Massalkhi, B. Tercero, P. de Vicente, J.-C. Guillemin, J. G. de la Concepcion, F. Rico-Villas, S. Zeng, S. Martin, M. A. Requena-Torres, F. Tonolo, S. Alessandrini, L. Dore, V. Barone, C. Puzzarini, *Precursors of the RNA-world in space: Detection of (Z)-1,2-ethene-diol in the interstellar medium, a key intermediate in sugar formation*, *Astrophys. J. Lett.*, 929, L11 (2022)
- 20) L. Bizzocchi*, S. Alessandrini*, M. Melosso*, C. Puzzarini*, *Dipolar spin-spin coupling as auxiliary tool for structure determination of small isolated molecules*. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, 15173 (2022)
- 21) A. Melli, M. Melosso*, L. Bizzocchi, S. Alessandrini, N. Jiang, F. Tonolo, S. Boi, G. Castellan, C. Sapienza, J-C. Guillemin, L. Dore, C. Puzzarini*, *Rotational Spectra of Unsaturated Carbon Chains Produced by Pyrolysis: The Case of Propadienone, Cyanovinylacetylene, and Allenylacetylene.*, *J. Phys. Chem. A*, 126, 6210, (2022)
- 22) P. Recio[†], S. Alessandrini[†], G. Vanuzzo, G. Pannacci, A. Baggioli, D. Marchione, A. Caracciolo, V. J. Murray, P. Casavecchia, N. Balucani*, C. Cavallotti*, C. Puzzarini*, V. Barone*, *Intersystem crossing in the entrance channel of the reaction of O (³P) with pyridine*, *Nat. Chem.*, 14, 1405 (2022)
- 23) H. Ye, S. Alessandrini, M. Melosso, C. Puzzarini*, *Exploiting the "Lego brick" approach to predict accurate molecular structures of PAHs and PANHs*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, 23254 (2022)
- 24) D. Alberton*, L. Bizzocchi, N. Jiang, M. Melosso, V. M. Rivilla, A. Pietropolli Charmet, B.M. Giuliano, P. Caselli, C. Puzzarini, S. Alessandrini, L. Dore, I. Jiménez-Serra, J. Martín-Pintado, *Laboratory spectroscopy of allylimine and tentative detection towards the G+0.693-0.027 molecular cloud*, *Astron. Astrophys.*, 669, A93 (2023)
- 25) N. Jiang, M. Melosso*, S. Alessandrini, L. Bizzocchi, M.A. Martin-Drumel, O. Pirali, C. Puzzarini*, *Insights into the molecular structure and infrared spectrum of the prebiotic species aminoacetonitrile*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25, 4754 (2023)
- 26) S. Alessandrini*, L. Bizzocchi, M. Melosso, C. Puzzarini, *Protonation of apolar species: From Cl₂H⁺ to (E)-NCCHCHCNH⁺ through computational investigations*, *Front. Astron. Space Sci.*, 10, 1128896 (2023)
- 27) C. Puzzarini*, S. Alessandrini, L. Bizzocchi*, M. Melosso*, *Hunting for interstellar molecules: Rotational spectra of reactive species*, *Faraday Discuss.* 2023, Accepted (<https://doi.org/10.1039/D3FD00052D>)
- 28) S. Alessandrini*, M. Melosso, V. M. Rivilla, L. Bizzocchi, C. Puzzarini*, *Computational Protocol for the Identification of Candidates for Radioastronomical Detection and Its Application to the C₃H₃NO Family of Isomers Molecules*, 28, 3226 (2023).

CONFERENZE

Lista di Conferenze, Seminari e Scuole (aggiornato a Maggio 2023)

- Presentazione Poster al congresso "ERC AdG-Barone DREAMS: final meeting", Scuola Normale Superiore, Pisa, 29 Novembre - 2 Dicembre 2017.
- Partecipazione al congresso ASTRO-Winter Modeling "Advances in computational and experimental modeling: Application to Astrochemistry", Università di Bologna, Bologna, 15-16 Febbraio 2018.
- Presentazione Poster all'AstrochemII – 2nd Italian Workshop on Astrochemistry "Chemical Evolution in our Galaxy: Spectroscopy, Observations and Reactivity", Follonica, 13-16 Giugno 2018.
- Partecipazione alla Scuola Estiva "Lake Como School of Advanced Studies - Computational Spectroscopy: Bridging Theory and Experiment", Lago di Como, 9-14 Settembre 2018.

- Partecipazione con presentazione di un poster alla Scuola Estiva "Modern Wavefunctions Methods in Electronic Structure Theory Summer School", Gelsenkirchen, 30 Settembre - 5 Ottobre 2018.
- Conferenza su invito a "Winter Modeling 2019 - Special Edition on Valentine's Day", Università di Napoli Federico II, Napoli, 14 Febbraio 2019. Titolo: "Benchmark of quantum-chemical computations for molecules containing second-row atoms."
- Contributo orale al 4th COST- MOLIM General Meeting, Università di Bologna, Bologna, 27 Febbraio – 1 Marzo 2019 Titolo: "Benchmark of quantum-chemical computations for molecules containing second-row atoms."
- Contributo orale alla conferenza "Young Reaserchers Meet Molecular Spectroscopy", Scuola Normale Superiore, Pisa, 4 -5 Aprile 2019. Titolo: "Benchmark of quantum-chemical computations for molecules containing second-row atoms."
- Contributo orale al VI Congresso della Divisione di Chimica Teoria e Computazionale della Società Chimica Italiana (SCI), Università della Calabria, Arcavacata di Rende, 19 -20 Settembre 2019. Titolo: "Noncovalent Interactions: an improved and affordable model chemistry."
- Conferenza su invito al Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation (VS-CTC) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (SCI), 21 Dicembre 2020. Titolo: "The junChS composite scheme: an affordable model chemistry for noncovalent interactions."
- Contributo orale nella section "Structure Determination" all'International Symposium on Molecular Spectroscopy, Online Meeting, 21-25 Giugno 2021. Titolo: "The equilibrium structure of small radicals: the semi-experimental approach at work."
- Partecipazione alla riunione online Astrochemical Frontiers 2021, Online Meeting, 5-9 Luglio 2021.
- Presentazione Orale al Merck Young Chemists' Symposium (MYCS) organizzato dalla Divisione Giovani della Società Chimica Italiana (SCI), Rimini, 22-24 Novembre 2021. Titolo: "In search of P-bearing species in astronomical environments: the reaction between CH₂NH and the CP radical."
- Presentazione al "Winter Modeling 2022", Università d Napoli Federico II, Napoli, 14-15 Febbraio 2022. Titolo: "Simulating the gas-phase reaction between oxirane and the CN radical in interstellar conditions."
- Presentazione a "COSPAR 44th Scientific Assembly, Session F3.1", Atene, Grecia 15-19 luglio 2022. Titolo: "Ab initio modeling of gas-phase reactions in the interstellar medium."
- Partecipazione (con presentazione di un poster) alla Scuola Invernale "Les Houches School of Physics, Laboratory Astrophysics", 5-10 febbraio del 2023, Les Houches, France.
- Presentazione al congresso "Ischia Summer Modeling: Challenges of Molecular Sciences Towards 2030", Ischia, 5-7 Settembre 2022. Titolo: "Explicit Correlated F12 Composite Schemes for Noncovalent Systems: Interaction Energy and Geometry."
- Conferenza su invito al "Winter Modeling 2022(bis) - NAPLES: A very Special Edition in the Fall", Napoli, 10-11 Novembre 2022. Titolo: "Intersystem crossing in the entrance channel of the reaction between O(³P) and pyridine."

- Conferenza su invito a “Winter Modeling 2023 – New frontiers in astrochemistry and astrobiology”, Napoli, 23-24 Febbraio 2023. Titolo: “Protonation of apolar species: from Cl_2H^+ to $E\text{-NCCHCHCNH}^+$ ”
- Contributo orale al WG1-COSY Zoom Online Meeting on "New Methods for the Description of Non-Covalent Interactions", 23 Maggio 2023.
- Conferenza su invito a “25th International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research and Graduate Research Day (GRD)”, che si terrà a Bologna dall’11 al 15 settembre 2023.

SEMINARI E ATTIVITÀ DI SUPERVISIONE

Seminario in gruppo di ricerca	UCL London's Global University, 23 Settembre 2021	Seminario nel gruppo Trove/ExoMol del professor Sergei Yurchenko. Titolo seminario: “ <i>Bites of Astrochemistry and the search for Phosphorus</i> ” (30min)
Tutor/Correlatore Tesi Magistrale	Marzo 2021- Dicembre 2021	Tesi Magistrale di Giorgia Giusti, presso l’Università di Bologna. Titolo tesi: “ <i>Indagine di una superficie di energia potenziale reattiva di interesse astrochimico: la reazione tra l’ossirano e il radicale metilidene</i> ”
Tutor/Correlatore Tesi Magistrale	Marzo 2021- Ottobre 2021	Tesi Magistrale di Mattia Ravasio, presso l’università Milano Bicocca con tirocinio svolto presso l’università di Bologna. Titolo tesi: “ <i>Quantum-chemical modelling of gas-phase reactions in the interstellar medium: the formation of glycolonitrile and methyl isocyanate</i> ”
PhD Tutor	Novembre 2021- presente	Attualmente supervisiono la dottoranda Hexu Ye presso l’Università di Bologna.
Social Media Manager	Ottobre 2019 - presente	Gestisco l’account Twitter del gruppo Rot&Comp di Bologna, tenendo aggiornato l’account con le più recenti pubblicazioni del gruppo. Occasionalmente ho gestito anche account Facebook e Twitter di congressi, come il Winter Modeling del 2022.

ONORIFICENZE E RICONOSCIMENTI

Lista di Premi vinti fino a Maggio 2022

- Vincitrice di una Borsa Erasmus Traineeship di tre mesi per lo svolgimento di un tirocinio formativo presso l’università di Mainz, Germania.
- Vincitrice del premio miglior poster al AstrochemII - 2 Italian Workshop on Astrochemistry "Chemical Evolution in our Galaxy: Spectroscopy, Observations and Reactivity", Follonica, 13 -16 Giugno 2018
- Vincitrice del premio per la miglior pubblicazione nel campo dello sviluppo metodologico della divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società di Chimica Italiana. Ottobre 2020.

- Finalista del Contest "ChiMiCapisce 2023" organizzato dal gruppo interdivisionale per la "Diffusione della Cultura Chimica" della Società Chimica Italiana. La finale si è tenuta presso il dipartimento di chimica dell'università di Bari il 23 maggio 2023. Il titolo della mia presentazione era: "Astrochimica: le reazioni nel mezzo interstellare".

ATTIVITÀ DIDATTICA

Periodo di svolgimento (data inizio e data fine attività)	Istituzione e Stato	Breve descrizione dell'attività didattica svolta
dal 01/09/2019 al 29/02/2020	Università di Bologna, Italia	Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale "Photochemistry and Molecular Materials" per l'anno 2019/2020 (2h) CHIM/02
dal 01/03/2020 al 31/08/2020	Università di Bologna, Italia	Assistente al Laboratorio del corso di "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in "Chimica" per l'anno 2019/2020 (6h) CHIM/02
dal 01/09/2020 al 28/02/2021	Università di Bologna, Italia	Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale "Photochemistry and Molecular Materials" per l'anno 2020/2021 (4h) CHIM/02
dal 19/04/2021 al 30/04/2022	Università di Bologna, Italia	Attività di Tutor per il modulo 2 del corso "Metodi Spettroscopici" della laurea triennale in "Chimica e Chimica dei Materiali" per l'anno 2020/2021 (32h) CHIM/02
dal 01/03/2021 al 31/08/2021	Università di Bologna, Italia	Assistente al Laboratorio del corso di "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in "Chimica" per l'anno 2020/2021 (12h) CHIM/02
dal 01/09/2021 al 28/02/2022	Università di Bologna, Italia	Assistente al Laboratorio del corso di "Computational Spectroscopy" della laurea magistrale "Photochemistry and Molecular Materials" per l'anno 2021/2022 (2h) CHIM/02
dal 16/02/2022 al 16/02/2022	Scuola Superiore Meridionale, Università di Napoli Federico II, Italia	Lezione di 2h riguardo i sistemi non-covalenti per il primo anno del corso di dottorato in "Molecular Sciences for Earth and Space" (MOSES) della Scuola Superiore Meridionale
dal 04/04/2022 al 22/04/2022	Università di Bologna, Italia	Attività di Tutor per il modulo 2 del corso "Metodi Spettroscopici" della laurea triennale in "Chimica e Chimica dei Materiali" per l'anno 2021/2022 (32h) CHIM/02
dal 23/05/2022 al 27/05/2022	Università di Bologna, Italia	Attività di Tutor per il corso "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in "Chimica" per l'anno 2021/2022 (16h) CHIM/02
Dal 28/11/2022 al 30/11/2022	Università di Bologna, Italia	Attività di Tutor per il corso "Proprietà Chimiche da Spettroscopia ad Alta Risoluzione" della laurea magistrale in "Chimica" per l'anno 2022/2023 (12h) CHIM/02
Dal 16/05/2023 al 31/05/2023	Università di Bologna, Italia	Attività di Tutor per il corso "Termodinamica e Modellistica Molecolare" della laurea magistrale in "Chimica" per l'anno 2022/2023 (16h) CHIM/02

Come tutor didattico del corso in "Metodi Spettroscopici" ho imparato ad utilizzare in modo indipendente strumenti IR a trasformata di Fourier (FT-IR), Spettrofotometri UV-Vis e Raman, insieme ai rispettivi software.

Per i corsi di "Termodinamica e Modellistica molecolare" e "Computational Spectroscopy" ho sviluppato, in collaborazione con la professoressa C. Puzzarini, esercitazioni e tutorial dei vari programmi utilizzati durante il laboratorio. Lezioni ed esercitazioni sono state svolte in inglese per il corso di "Photochemistry and Molecular Materials".

ESPERIENZE ALL'ESTERO

Tirocinio di tre mesi all'Università Johannes Gutenberg di Mainz, Germania

[06/03/2017 – 06/06/2017]

Ho svolto il tirocinio propedeutico alla tesi magistrale presso il gruppo di chimica teorica del professor Juergen Gauss grazie ad una borsa Erasmus Traineeship (3 mesi, 6/03/2017-6/06/2017)

Tirocinio di tre mesi presso l'Università di Oxford

[01/07/2021 – 01/10/2021]

Tirocinio di tre mesi presso il gruppo di chimica teoria del professor David Tew, University of Oxford, UK.

ATTIVITÀ DI RICERCA E EDITORIALE

Attività di Ricerca e Editoriale a Maggio 2022

Statistiche citazionali a Maggio 2022

H-index: 10

Pubblicazioni: 28 di cui 11 come primo nome e 8 come corresponding author

Citazioni: 340

Attività di ricerca

La mia attività di ricerca è volta allo sviluppo e all'applicazione di metodi computazionali molto accurati per la descrizione di sistemi molecolari di piccole-medie dimensioni, siano essi specie isolate o complessi bi-molecolari legati in modo non-covalente. L'obiettivo finale di queste analisi è quello di avere una caratterizzazione energetica accurata delle specie considerate e, eventualmente, una loro caratterizzazione spettroscopica. Quest'ultima è focalizzata soprattutto all'ottenimento di spettri *ab initio* rotazionali e vibro-rotazionali. Le considerazioni energetiche, invece, possono essere impiegate per lo studio di superfici di energia potenziale (PES) che vengono da me utilizzate in campo astrochimico per studiare famiglie di isomeri strutturali o analizzare vari cammini di reazione (PES reattive). La modellizzazione delle reazioni astrochimiche in fase gas si basa sull'investigazione di reazioni che rispettano tre criteri: (i) esotermicità dei prodotti, (ii) approccio senza barriera tra i due reagenti e (iii) assenza di barriere energetiche ad energia più alta dei reagenti. In questi casi, un'accurata stima delle barriere di reazione è fondamentale per capire i cammini accessibili nei possibili ambienti astrochimici, generalmente caratterizzati da basse temperature ($T < 100$ K) e basse pressioni (circa 10^{-15} atm).

L'accuratezza di queste barriere energetiche viene ottenuta nei miei lavori grazie all'applicazione di schemi compositi, dove numerosi contributi energetici sono calcolati al miglior livello di teoria possibile considerando la dimensione del sistema in esame. Quando i cammini di reazione sono ben caratterizzati per via computazionale, il passo successivo è ricavare le costanti cinetiche della reazione, le quali determinano l'eventuale formazione del prodotto di interesse e di eventuali co-prodotti, nelle condizioni del mezzo interstellare. Considerando la scala dei tempi in ambito astronomico, le costanti cinetiche risultano essere già significative se il loro valore è intorno a $10^{-16}/10^{-15}$ $\text{cm}^3 \text{molecole}^{-1} \text{s}^{-1}$.

Attività editoriale

Top Coordinator del Research Topic "*Chemical Evolution Across Space: the PAH connection from Interstellar Molecules to Prebiotic Processes and Beyond*" per la rivista "Frontiers in Astronomy and Space Sciences" (Astrochemistry and Astrobiology Sections) and "Frontiers in Chemistry" (Astrochemistry Section), Topic Editor: Prof. V. Barone, Prof. M. d'Ischia

Guest Editor insieme alla professoressa C. Pizzarini della Special Issue "Spectroscopic and Theoretical Methods to Investigate Interstellar Medium" della rivista *Molecules*, sezione "Applied Chemistry". Link: https://www.mdpi.com/journal/molecules/special_issues/B75FD21NLF

Reviewer per riviste in campo chimico-fisico, come *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*, *Journal of Physical Chemistry*, *ACS Earth and Space Sciences* and *Publications of the Astronomical Society of Australia*.

PATENTE DI GUIDA

Patente di guida: B e A

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali ai sensi del D.L. 196/2003
Bologna, 15/05/2023