

Curriculum Vitae del Dr. Simone Meloni

Educazione

- 1997-2000 (15/11/2000) Dottore di ricerca in Scienze Chimiche, Università “Sapienza”, Roma. Tesi: “Struttura e processi in fase solida studiati per mezzo della dinamica molecolare e la diffrazione a raggi”, Supervisore Prof. R. Caminiti
- 1989-1997 (17/7/1997) Laurea vecchio ordinamento, Università “Sapienza”, Roma. Tesi: “Calcolo delle forze di scambio in collisioni elettrone/molecola”, Supervisore Prof. F. A. Gianturco, Votazione: 110/110 con Lode – Servizio militare obbligatorio: 9/1991-8/1992
-

Esperienze Lavorative

- 11/2013- Ricercatore post-dottorale presso Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- 1/2002 – 10/2013 Dipendente a tempo indeterminato presso il centro di Supercalcolo CASPUR e CINECA.
- 5/2011 – 10/2012 Ricercatore “Marie Curie” presso lo University College Dublin.
- 9/2009 – 4/2011 Ricercatore post-dottorale presso il laboratorio di “Advanced Molecular Simulation” allo University College Dublin.
- 2001 Borsa di studio presso il centro di Supercalcolo CASPUR
- 1-3/2001 Ospite post-dottorale presso il gruppo del Prof. R. Car, Princeton University, Princeton, NJ (USA).
- 3/1999-2/2000 Studente di dottorato ospite presso il gruppo del Prof. M. Parrinello al Max-Planck-Institute für Festkörperforschung, Stuttgart (DE).
- 1994-1996 Assistente non-laureato per il corso “Esercitazioni di Chimica Fisica II” – Prof. Caminiti, Dip. Chimica, Università “Sapienza”, Roma.

Insegnamento

- 2013 Corso per studenti di dottorato di “Sapienza” and “Roma Tre” intitolato “Studio di eventi rari attraverso tecniche di simulazione al computer”
- 2012 Corso per studenti di dottorato presso lo University College Dublin intitolato “Theory and computational techniques to study rare events in atomistic and molecular simulations.”
- 2005-2009, 2011 Insegnamento presso la scuola estiva CASPUR di calcolo avanzato “Programmazione parallela per applicazioni scientifiche”
- 2014 Corso per studenti di dottorato presso l’università Duisburg-Essen University (GE) “A stroll along modern rare event methods: general ideas and derivation of some of the most promising techniques”
- 2015 Corso per studenti di dottorato presso l’università “Sapienza” intitolato “Introduzione alla bioinformatica”

Attività di supervisione e coordinamento

- 2006-2009 Dr. Fabio Sterpone, ricercatore post-dottorale, presso il centro di supercomputing CASPUR; attualmente ricercatore a tempo indeterminato presso IBPC-CNRS, Paris - FR
- 2007-2013 Dr. Mariella Ippolito, ricercatore post-dottorale presso il centro di supercomputing CASPUR; attualmente dipendente a tempo indeterminato presso il CINECA
- 2004-2011 Dr. Luca Ferraro, dipendente a tempo indeterminato CASPUR, membro del gruppo di

- sviluppo di software per dinamica molecolare e Monte Carlo che coordinavo
- 2007-2010 Sergio Orlandini, studente di dottorato che ha svolto con me una tesi intitolata “Formazione, trasformazione e trasporto in strutture complesse a base”, Università “Sapienza”, Rome; attualmente dipendente a tempo indeterminato presso il CINECA
- 2010 Pierre-Antoine Geslin, studente di master della scuola della Ecole Nationale de Mines de St-Etienne (Fr) che ha svolto con me la sua tesi intitolata “Sviluppo di un nuovo metodo per lo studio della dinamica di vacanza” presso lo University College Dublin (IE); attualmente ricercatore post-dottorale presso la Northwestern University, Boston
- 2011 Dominika Lesniki, studente di laurea triennale (bachelorette) presso l’École Normal Supérieure de Paris che ha svolto con me la tesi intitolata, “Calcolo della cinetica di diffusione di vacanze per mezzo della teoria dello stato di transizione con correzioni dinamiche”; ha recentemente completato il suo dottorato sotto la guida del Prof. Vuilleumier, presso l’École Normal Supérieure de Paris
- 2010-2013 Co-supervisione della tesi di dottorato del Dr. Marco Lauricella presso lo University College Dublin, “Mechanismi e cinetiche di nucleazione di clatrati acquosi”; attualmente ricercatore post-dottorale presso il CNR
- 2010-2012 Co-supervisione della tesi di dottorato del Dr. Jeremy Lucid presso lo University College Dublin, “Materiali polimerici per il trasporto protonico in membrane per celle a combustibile”; attualmente impiegato presso una società di consulenza finanziaria, Liquidnet, N.Y.-USA
- 2010-2012 Co-supervisione della tesi di dottorato del Dr. Alin Marin Elena, “Meccanismo e cinetica delle reazioni di deprotonazione di acidi deboli attraverso simulazioni di eventi rari e tecniche *ab initio*”; attualmente dipendente a tempo indeterminato presso il Daresbury Lab (UK).
- 2011-2013 Co-supervisione della tesi di dottorato del Dr. Alberto Giacomello; attualmente ricercatore a tempo determinato presso il dipartimento di ingegneria meccanica e aerospaziale dell’Università “Sapienza”.
- 2012 Aditya Choudhary, studente di master dell’Institute of Technology, Banaras Hindu University (In), “Meccanismo di diffusione di vacanze studiato attraverso il metodo *Minimum free energy path*” presso lo University College Dublin (IE);
- 2013 Matteo Amabili, studente di laurea magistrale presso l’Università “Sapienza”, “Effetti quantistici dell’energia libera di dissociazione di HF in cluster acquiosi attraverso simulazioni *ab initio*”; attualmente studente di dottorato del dipartimento di ingegneria meccanica e aerospaziale, Università “Sapienza”
- 2013 Meisam Pourali, visiting PhD student, “Diffusion at the interface of simple systems by non-equilibrium molecular dynamics”, Univ. “Sapienza”, Rome (IT).

Finanziamenti e applicazioni per risorse computazionali

- Marie Curie IntraEuropean Fellowship (FP7-PEOPLE-2009-IEF), progetto “SimDepro: Deprotonation of organic molecules in solution by ab-initio MD and rare events simulation techniques.”, grant n. 255406, budget ~180000€.
- Partner del progetto FIRB 2010 “Clatrati idrati e and non-idrati: materiali multifunzionali per applicazioni nel campo dell’energia. Modellizzazione della cristallizzazione e diffusione associate alle loro applicazioni tecnologiche.”, grant n. RBF10ZUUK, budget ~324000€.
- Partner del progetto sinanziato dalla Science Foundation Ireland PI-GRANT “Advanced Molecular Simulations”, grant n. 08-IN.1-I1869, (total budget ~860000€). Responsabile per il coordinamento dei package “Energy and the Environment: long-term storage of CO₂ in natural gas hydrates, and hydrogen storage in solid state materials” e “ICT and Nano-Materials”.
- Partner del progetto SEED dell’Istituto Italiano di Tecnologia “SIMBEDD – Metodi Computazionali avanzati per la biofisica, disegno di medicinali e materiali per.”, grant n. 259, budget ~800000€.
- 2010: grant computazionale EC-DECI-DEISA, ~2Mh

- 2009-2014: due progetti “Classe A” e cinque progetti “classe C” presso lo Irish Centre for High-End Computing, per un totale di più di 5Mh.
- Partner in tre progetti EC-PRACE: due svolti/in corso di svolgimento presso il CINECA (IT), 9/2013-9/2014 and 3/2015-3/2016 - ~ 30Mh each, ed uno presso lo LRZ (DE), 9/2014-9/2015 - 17Mh
- Organizzatore di workshop, scuole e attività di networking finanziate da istituzioni italiane e internazionali per un totale di ~300000€ (dettagli descritti nella sezione “Contributi professionali”)

Attività di revisore di articoli scientifici

Dr. Meloni is reviewer of the American Chemical Society (J. Phys. Chem., Langmuir, JCTC), The American Physical Society (Phys. Rev. B; Phys. Rev. X, Phys. Rev. Lett.), the European Physical Society (European Physical Journal and European Physical Journal Plus), Institute of Physics (J. Phys. Cond. Mat.), Elsevier (Surface Science, Chemical Physics Letters, and Journal of Hydrogen Energy), and Royal Society of Chemistry (J. Mat. Chem. A). Dr. Meloni is also member of the PRACE reviewer panel.

Contributi professionali

- | | |
|-----------|--|
| 2006-2009 | Coordinatore del programma di corsi di “Programmazione Scientifica e Tecnica” del centro di Supercomputing CASPUR |
| 2006-2009 | Coordinatore del progetto della European Science Foundation “Forward Look: European Computational Science: The Lincei Initiative: from computers to scientific excellence”. Organizzazione di sette workshop, più di 10 meeting dello steering committee, e coordinamento di tutte le attività, inclusa la scrittura e presentazione dei report intermedi ed il report. Reperimento di una parte dei fondi attraverso scrittura di progetti sottomessi a selezione presso diverse agenzie di finanziamento internazionali, e gestione dei fondi dell’intero progetto, ~200000€ |
| 2008 | Organizzatore della scuola “Progress in simulating activated processes”, Valle Capore (Rome, IT), 26-30 May 2008, finanziata dal progetto Marie-Curie MolSimu e dal centro CECAM, ~45000€ |
| 2008 | Organizzatore del workshop CECAM “Standardization and databasing of classical and ab-initio atomistic simulations”, ETH, Zurich (CH), 18-19 Settembre 2008. ~7000€ |
| 2010 | Organizzatore del workshop “Simulations and experiments on Materials for Hydrogen Storage”, Dublin (IE), 11-13 October 2010, finanziato dal centro ACAM-CECAM centre, Science Foundation Ireland, dal network SimBioMa e dal Pacific Northwest National Laboratory, ~21000€. |
| 2013 | Organizzatore del workshop “Five pieces and a do in computational physics, chemistry, biology, mathematics and engineering”, Rome (IT), 18-20 December 2013, ~20000€ |
| 2012-2013 | Guest-editor di Molecular Physics per un numero speciale pubblicato in occasione del 70-mo anniversario di Giovanni Ciccotti |
| 2014 | Editore della sezione di simulazioni molecolari della Springer Encyclopaedia of Nanotechnology |
| 2014 | Organizzatore del Workshop “Binding free energy and kinetics: computation meets experiments”, Genova (IT), 10 th -12 th June 2014 |

Lista delle pubblicazioni (‡ indica *corresponding authors*)

- 42- “Unravelling the Salvinia paradox: design principles for submerged superhydrophobicity”, M. Amabili, A. Giacomello, S. Meloni, and C.M. Casciola, accepted for publication on *Advanced Materials Interface*, **selected for the cover** and *Materials Views*
- 41 - “Clathrate structure-type recognition: application to hydrate nucleation and crystallisation”, Lauricella M., Meloni S. ‡, Liang S., English N. J., Kusalik P. G., Ciccotti G., *J. Chem. Phys.* **142**, 244503 (2015)

- 40 - "Free Energies for Rare Events: Temperature Accelerated MD and MC" Meloni S.[‡] and Ciccotti G., *The European Physical Journal Special Topics*, 10.1140/epjst/e2015-02418-7 (2015)
- 39 - "Mechanism of the Cassie-Wenzel transition via the atomistic and continuum string method" Giacomello A., Meloni S.[‡], Mueller M., Casciola C. M., *J. Chem. Phys.* **142**, 104701 (2015)
- 38 - "Nucleation of silicon nanoparticles in amorphous silicon dioxide matrices", Meloni S.[‡], *AIP Conf. Proc.* **1624**, 95 (2014)
- 37 - "Relaxation of a steep density gradient in a Lennard-Jones fluid: comparison between the micro and macroscopic description of the process", Pourali M., Meloni S.[‡], Magaletti F., Maghari A., Casciola C. M., Ciccotti G., *J. Chem. Phys.* **141**, 154107 (2014)
- 36 - "Clathrate hydrates nucleation mechanism by atomistic simulations", Lauricella M., Meloni S.[‡], English N. J., Peters B., Ciccotti G., *J. Phys. Chem. C*, **118**, 22847 (2014)
- 35 - "Massively-parallel molecular dynamics simulation of formation of clathrate-hydrate precursors at planar water-methane interfaces: insights into heterogeneous nucleation", English N., Lauricella M., Meloni S., *J. Chem. Phys.* **140**, 204714 (2014)
- 34 - "Equilibrium and Rate Constants, and Reaction Mechanism of the HF Dissociation in the HF(H₂O)₇ Cluster by ab Initio Rare Event Simulations", Elena A., Meloni S.[‡], and Ciccotti G., *J. Phys. Chem. A*, **117**, 13039 (2013)
- 33 - "Surface patterning for wetting and liquid flow control", Giacomello A., Chinappi M., Meloni S., Casciola C. M., *Eur. Cells Matter.* **26**, 82 (2013)
- 32 - "Geometry as a catalyst: a route to cavitation control" Giacomello A., Chinappi M., Meloni S., Casciola C. M., *Langmuir* **29**, 14873 (2013)
- 31 - "Vacancy dynamics by rare events simulation techniques", Geslin P.-A., Ciccotti G., and Meloni S.[‡], *J. Chem. Phys.* **138**, 144103 (2013)
- 30 - "Probing the morphologies of hydrated Nafion using temperature-accelerated molecular dynamics simulations", Lucid J., Meloni S.[‡], McKernan D., Spohr E., Ciccotti G., *J. Phys. Chem. C*, **117**, 774 (2013)
- 29 - "Metastable wetting on superhydrophobic surfaces: continuum and atomistic views of the Cassie-Baxter/Wenzel transition", Giacomello A., Chinappi M., Meloni S., Casciola C. M.[‡], *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 226102 (2012)
- 28 - "The early stage of the dehydrogenation of NaAlH₄ by ab initio rare events simulations", Sterpone F.[‡], Bonella S., Meloni S.[‡], *J. Phys. Chem. C*, **116**, 19636 (2012)
- 27 - "Cassie-Baxter and Wenzel States on a Nanostructured Surface: Phase Diagram, Metastabilities, and Transition Mechanism by Atomistic Free Energy Calculations", Giacomello A., Meloni S.[‡], Chinappi M., Casciola C. M., *Langmuir*, **28**, 10764 (2012)
- 26 - "Theory and methods for rare events", Bonella S.[‡], Meloni S.[‡], G. Ciccotti, *Eur. Phys. J. B*, **85**, 97 (2012) – invited review article
- 25 - "The influence of silicon nanoclusters on the optical properties of a-SiN_x samples: A theoretical study", Guerra R.[‡], Ippolito M., Meloni S., Ossicini S., *Appl. Phys. Lett.*, **100**, 181905 (2012)
- 24 - "Combining rare events techniques: phase change in Si nanoparticles.", Orlandini S., Meloni S.[‡], Ciccotti G., *J. Stat. Phys.* **145**, 812 (2011)
- 23 - "Hydrodynamics from statistical mechanics: combined dynamical-NEMD and conditional sampling to relax an interface between two immiscible liquids.", Orlandini S., Meloni S.[‡], Ciccotti G., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 13177 (2011)
- 22 - "Order-disorder phase change in embedded Si nano-particles", Orlandini S., Meloni S.[‡], Colombo L., *Phys. Rev. B* **83**, 235303 (2011)
- 21 - "Atomistic structure of amorphous silicon nitride from classical molecular dynamics simulations.",

- Ippolito M. and Meloni S. ‡, *Phys. Rev. B* **83** 165209 (2011)
- 20 - "Hydrodynamics from dynamical non-equilibrium MD", Orlandini S., Meloni S. ‡, and Ciccotti G., *AIP Conference Proceedings* **1332**, 77-95 (2011)
 - 19 - "Temperature Accelerated Monte Carlo (TAMC): a method for sampling the free energy surface of non-analytical collective variables.", Ciccotti G. and Meloni S. ‡, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 5952 - 5959 (2011)
 - 18 - "Mechanisms of self-diffusion in stoichiometric and sub-stoichiometric amorphous silicon dioxide" Orlandini S., Meloni S. ‡, Ippolito M., Colombo L., *Phys. Rev. B* **81**, 014203 (2010)
 - 17 - "Modified single sweep method for reconstructing free-energy landscapes", Monteferrante M., Bonella S. ‡, Meloni S., Ciccotti G., *Molecular Simulation* **35**, 1116 (2009)
 - 16 - "Interface structure and defects of silicon nanocrystals embedded into a-SiO₂", Ippolito M., Meloni S. ‡, Colombo L., *Appl. Phys. Lett.*, **93**, 153109 (2008)
 - 15 - "Structural and electronic properties of metal doped organic semiconductors", Zazza C., Meloni S., Palma A. ‡, *Mod. Phys. Lett. B* **22**, 1609-1631 (2008) – invited review article
 - 14 - "Calculations of free energy barriers for local mechanisms of hydrogen diffusion in alanates", Monteferrante M, Bonella S. ‡, Meloni S, Vanden-Eijnden E, Ciccotti G, *Sci. Model. Simul.* **15**, 187-206 (2008)
 - 13 - "Dissociative versus molecular adsorption of phenol on Si(100) 2x1: a first principle calculation", Carbone M. ‡, Meloni S., Caminiti R., *Phys. Rev. B*, **76**, 085332 (2007)
 - 12 - "Quasi-One-Dimensional K-O Chain in PTCDA Thin Films: Evidence from First-Principles Calculations", Zazza C, Meloni S, Palma A ‡, Knupfer M, Fuentes GG, Car R, *Phys. Rev. Lett.* , **98**, 046401 (2007)
 - 11 - "Efficient particle labeling in atomistic simulations", Meloni S ‡, Rosati M, Colombo L, *J. Chem. Phys.*, **126**, 121102 (2007)
 - 10 - "Ab Initio Simulation of Carbon Clustering on an Ni(111) Surface: A Model of the Poisoning of Nickel-Based Catalysts", Kalibaeva G, Vuilleumier R, Meloni S ‡, Alavi A, Ciccotti G, Rosei R, *J. Phys. Chem. B*, **110**, 3638-3646 (2006)
 - 9 - "Molecular and Solid State (8-hydroxy-quinoline)aluminum Interaction with Magnesium: a First Principles Study", Meloni S, Palma A ‡, Kahn A, Schwartz J, Car R, *J. Appl. Phys.*, **98**, 023707 (2005)
 - 8 - "Computational Materials Science application programming interface (CMSapi): a tool for developing applications for atomistic simulations", Meloni S ‡, Rosati M, Federico A, Ferraro L, Mattoni A, Colombo L, *Comp. Phys. Comm.*, **169**, 462-466 (2005)
 - 7 - "Boron ripening in amorphous silicon by large scale molecular dynamics simulations", Mattoni A, Colombo L ‡, Meloni S, Federico A, Rosati M, *Comp. Mater. Sci.* **30**, 43-149 (2004)
 - 6 - "Energy-dispersive X-ray diffraction on thin films and its application to superconducting samples", Albertini VR ‡, Paci B, Meloni S, Caminiti R, Bencivenni L, *J. Appl. Crystallogr.*, **36**, 43-47 (2003)
 - 5 - "Chemistry between magnesium and multiple molecules in tris(8-hydroxyquinoline) aluminum films", Meloni S, Palma A ‡, Schwartz J, Kahn A, Car R, *J. Am Chem. Soc.*, **125**, 7808-7809 (2003)
 - 4 - "A novel implicit Newton-Raphson geometry optimization method for density functional theory calculations", Filippone F ‡, Meloni S, Parrinello M, *J. Chem. Phys.*, **115**, 636-642 (2001)
 - 3 - The monoclinic I2 structure of bassanite, calcium sulphate hemihydrate (CaSO₄ – 0.5H₂O)", Ballirano P ‡, Maras A, Meloni S, Caminiti R, *Eur. J. Mineral.*, **13**, 985-993 (2001)
 - 2 - "SO₂Cl₂, SOCl₂: energy dispersive X-ray diffraction, ab initio and molecular dynamics calculation", Meloni S., Pieretti A., Bencivenni L., Albertini V.R., Sadun C., Caminiti R., *Comput. Mater. Sci.*, **20**, 407-415 (2001)
 - 1 - "Low-energy electron scattering from the water molecule: Angular distributions and rotational excitation",

Gianturco FA[‡], Meloni S, Paoletti P, Lucchese RR, Sanna N, J. Chem. Phys. **108**, 4002-4012 (1998)

Capitoli di libro

1 - "Calculations of free energy barriers for local mechanisms of hydrogen diffusion in aluminates", Monteferrante M, Bonella S, Meloni S, Vanden Eijnden E, Ciccotti G in Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 2009, Volume 68, 187-206

To better illustrate my research activity and my service to the community I also provide the following information:

Articoli sottomessi per pubblicazione su riviste internazionali.

- S1 - "Hysteresis in perovskite solar cells: experimental and theoretical evidence of its defect-related origin" Meloni S., Moehl T., Franckevicius M., Roethlisberger U., Grätzel M, sottomesso a Nature Communication
- S2 - "Entropic Stabilization of Mixed A-Cation ABX₃ Metal Halide Perovskites and Their Use in High Performance Perovskite Solar Cells", Yi C., Luo J., Meloni S., Boziki A., Ashari-Astani N., Grätzel C., Zakeeruddin S. M., Rothlisberger U., and Grätzel M., sottomesso a Nature Energy

Manoscritti di prossima sottomissione

- TBS1. "Origin of band gap tunability of halide perovskites for solar cells applications" Meloni S. [‡], Palermo G., Ashari Astani N., Grätzel M., Roethlisberger U. (see <http://arxiv.org/pdf/1412.3659.pdf>)
- TBS2. "Effect of chemistry and crystal structure on electron and hole effective masses in halide perovskites", Ashari Astani N., Meloni S. [‡], Palermo G., Grätzel M., Roethlisberger U.
- TBS3. "temperature dependence of the photoluminescence spectrum of lead halide perovskites", I. Dar, J. G. Jean, S. Meloni, U. Roethlisberger, M. Graetzel

Manoscritti in preparazione

- IP1. "Mechanism of Kinetic Inhibition of Methane Clathrate Hydrate", Lauricella M., English N., Peters B., Ciccotti G., Meloni S. [‡]

Proceedings

- 1 - "Reduction on arrays: comparison of performance among different algorithms", Meloni S. [‡], Federico A., Rosati M., in Proc. EWOMP 2003 (2003)

Recenti comunicazioni orali a conferenze, workshop e scuole

- 24 - (Invited) "Filling the holes: how to discover and characterize shallow and deeper wells of free energy landscapes", Titignano (IT), BIC Workshop, 1st-4th July 2015
- 23 - "Hysteresis in perovskite solar cells: experimental and theoretical evidence of its defect-related origin", Roma (IT), HOPV15, 10th-13th May 2015
- 22 - (Invited) "Wetting of textured surfaces by advanced atomistic and continuum simulations", "Superhydrophobicity, bubble stability, and heterogeneous nucleation", Rome (IT), Joint CECAM Workshop and Sapienza Conference, Rome (IT), 25th-27th June 2014
- 21 - (Invited) "Methane clathrate hydrate nucleation mechanism by advanced sampling techniques", CECAM Workshop "Molecular-level understanding of nucleation", Lausanne (CH), 23rd-25th June 2014
- 20 - (Invited) "Multiscale simulations to study structural and electronic properties of Si nanoparticles embedded in a-SiO₂ and a-SiN_x dielectrics.", Conference "SiO₂, Advanced Dielectrics and Related Devices", Cagliari (IT), 16-18 June 2014

- 19 – (Invited) “Rare event methods: modern techniques and their application to challenging chemical and physical problems”, Physical and Theoretical Chemistry Colloquia, 23 April 2014, Univ. of Duisburg-Essen
- 18 – (Invited) “Superhydrophobicity lost: the Cassie-Baxter to Wenzel phase transition”, “Advanced Molecular Simulation Methods in the Physical Sciences”, Beijing (CH), 24th-30th July 2013
- 17 – (Speech given in name of Giovanni Ciccotti, invited speaker) “Time-dependent Non-equilibrium Molecular Dynamics”, Lorentz center international workshop “Modelling the Dynamics of Complex Molecular Systems”, Leiden (NL) 13th-24th August 2012
- 16 – (Invited) “A pseudo-quantum description of vacancy diffusion in crystals”, CECAM Workshop “Free energy calculations: from theory to applications”, “Modeling the dynamics of complex molecular systems” Conference, Leiden (NL) 13-24 August 2012
- 15 – (Invited) “A pseudo-quantum description of vacancy diffusion in crystals”, CECAM Workshop “Free energy calculations: from theory to applications”, Paris 4-8 June 2012
- 14 – “A novel approach to study vacancy dynamics in crystals (by rare event techniques)”, SimBioMa Conference, Konstanz (DE) 28 September – 1 October
- 13 – (invited) “Nanotechnology in materials and fibers”, workshop on Science and technology for the third millennium sportswear, University “Foro Italico”, Rome (IT) 11 April 2011
- 12 - (Invited) “Data Management in Europe”, ZCAM-CECAM workshop on Databases in Quantum Chemistry, Zaragoza (ES) 21-24 September 2010
- 11 - “Study of nucleation by rare event methods”, LAM 14, Rome (IT) 11-16 July 2011
- 10 - (Invited): “Hydrodynamics from non-equilibrium statistical mechanics: evolution of a curved interface between immiscible liquids”, SIMAI 2010, Cagliari (IT) 21-25 June 2010
- 9 - “Dehydrogenation mechanism in sodium alanates”, CPMD 2008, Trieste (IT) 23-27 June 2008
- 8 - “Dehydrogenation mechanism in sodium alanates”, SimBioMa Conference, Konstanz (DE) 5-8 April 2008
- 7 - “Ab-initio simulation of carbon clustering on Ni(111) surface: the bonding mechanism between Na and C.”, Conference on Computational Physics 2007, Brussels (BE) 5-8 September 2007
- 6 - “ESF Forward Look for non-hardware aspects of Computational Science Infrastructure”, Conference on Computational Physics 2007, Brussels (BE) 5-8 September 2007
- 5 - “Hydrogen Diffusion in Sodium Alanates”, Conference on Computational Physics 2007, Brussels (IT) 5-8 September 2007
- 4 - “Computational Material Science Application Programming Interface (CMSApi): a tool for developing applications for atomistic simulations”, INTERNATIONAL SCHOOL OF SOLID STATE PHYSICS - 34th course: Computer Simulations in Condensed Matter: from Materials to Chemical Biology.
- 3 - “Ab-initio study of carbon clustering on Ni(111) surface”, Conference on Computational Physics 2004, Genoa (IT) 1-4 September 2004
- 2 - “Computational Material Science Application Programming Interface (CMSApi): a tool for developing applications for atomistic simulations”, Conference on Computational Physics 2004, Genoa (IT) 1-4 September 2004
- 1 - “Reduction on arrays: comparison of performances between different algorithms”, Fifth European Workshop on OpenMP (EWOMP), 22-23 September 2003, Aachen (GE)

Posters

- 1 – “Structural, Electronic and Optical properties of CsPbX_{3-x}Y_x perovskites by ab initio simulations”, NanoGE – Hybrid and Organic Photovoltaics 2014, 11-14 May, Lausanne (CH)

Lower Mills