

## MASSIMILIANO ASCHI – CURRICULUM VITAE ET STUDIORUM

- 1986 – Maturità Classica (60/60) Conseguita presso il Liceo Statale Gaio Lucilio di Roma
- 1992 – Laurea in Chimica (110/110) Conseguita presso L'Università degli Studi di Roma 'La Sapienza'. Titolo della tesi : Chimica Ionica in Fase Gassosa della Nitrammide (relatore Prof. F. Cacace)
- 1993 – Abilitazione alla professione di chimico (Esame di Stato, Luglio 1993)
- 1993 – Obblighi di Leva come Obiettore di Coscienza (Unione Famiglie Handicappati)
- 1993 – Vincitore della selezione per Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche presso Dipartimento di Chimica Università degli Studi di Roma 'La Sapienza' (I classificato)
- 1993 – Selezionato (da curriculum di studio) per un Corso IBM-Università di Perugia in Chimica Computazionale
- 1994-1996 – Studente PhD presso il laboratorio di ricerca in Chimica Generale ed Inorganica del Prof. F. Cacace (Istituto di Farmacia – Università di Roma 'La Sapienza'). Il titolo di Dottore di Ricerca viene conseguito nel Luglio 1997 presso l'Università di Ferrara (Commissione Unica Nazionale – Settore Chimica Fisica).
- 1994 – Vincitore del premio Internazionale 'I.J.M.S. Best Student Paper Award' indetto dalla Elsevier
- 1996 – Vincitore di una borsa CNR-NATO
- 1997 – *Post-doc fellow* presso l'Università Tecnica di Berlino nei laboratori dei Proff. H. Schwarz (studio sperimentale di specie ioniche in alto vuoto tramite Strumenti a 2-settori e Spettroscopia di Ion Cyclotron Resonance). Nello stesso periodo approfondisce lo studio computazionale tramite metodi DFT (Laboratorio del Prof. W. Koch).
- 1998 – *Post-doc fellow* presso l'Università di Perugia (da febbraio a maggio) sotto la guida dei proff. Antonio Sgamellotti e Marzio Rosi (Chimica Computazionale)
- 1998-1999 – *Post-doc fellow* presso l'Università di Viterbo (da settembre 1998) sotto la guida del Prof. Grandinetti (Chimica Computazionale)
- 1999 – Docente a contratto di Chimica Generale presso il Corso di Diploma Universitario in Radiologia Presso l'Ospedale Belcolle di Viterbo
- 2000 – Docente a contratto di Radiochimica presso il Diploma Universitario in Chimica (Università dell'Aquila, sede distaccata di Avezzano)
- 2000-2001 – *Post-doc fellow* presso il laboratorio di Chimica Computazionale del Prof. A. Di Nola del Dipartimento di Chimica – Università di Roma 'La Sapienza'
- 2001 – Vincitore di una posizione da Professore Associato (Chimica Generale ed Inorganica) bandito dall'Università dell'Aquila.
- 2004 – Conferma di Professore Associato
- 2006 – Eletto nel Consiglio direttivo della Sezione Abruzzo della Società Chimica Italiana
- 2010 – Eletto presidente della Sezione Abruzzo della Società Chimica Italiana
- 2009-2017 : Attività di Orientamento per i Corsi di Laurea del CAD Chimica e Materiali dell'Università dell'Aquila ed attività di docente in corsi di aggiornamento nel Progetto Lauree Scientifiche (Teramo, novembre 2015; Pescara, maggio 2017)
- 2014 – Eletto per due volte consecutive Presidente del CAD (Consiglio di Area Didattica) in Chimica e Materiali dell'Università dell'Aquila (in scadenza nel 2019)
- 2018 – Eletto membro del Senato Accademico dell'Università dell'Aquila in qualità di docente rappresentante del Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche.
- 2018 – Da ottobre è professore ordinario di Chimica Generale ed Inorganica

### ATTIVITA' SCIENTIFICA.

Tra il 1994 ed il 2001 l'attività scientifica di Massimiliano Aschi si è incentrata sullo studio della reattività e delle proprietà termodinamiche di specie (essenzialmente ioniche) in fase gassosa, inizialmente attraverso metodologie sperimentali ad alta (radiolisi) che a bassa (ICR, ZAB, Triple-

Quadrupole MS) pressione e, successivamente, attraverso metodologie standard di chimica quantistica, sia *ab initio* che nell'ambito della teoria del funzionale della densità.

Nel 2001 comincia ad interessarsi di Dinamica Molecolare tramite campi di forza per lo studio di sistemi atomici-molecolari complessi (essenzialmente molecole e macromolecole biologiche in soluzione). Nello stesso anno, attraverso l'interazione con il gruppo del Prof. Di Nola in particolare con il Dr. Amadei, sviluppa ed implementa una metodologia mista quanto-classica detta Metodo della Matrice Perturbata (PMM). Dal 2002 ad oggi l'attività di Massimiliano Aschi si è quindi sviluppata attraverso due percorsi principali: uno più fondamentale, basato sulla evoluzione teorica e implementativa del PMM, ed un altro più applicativo attraverso un'intensa attività di collaborazione con gruppi sperimentali sia d'indirizzo biochimico che chimico organico ed inorganico.

Ad oggi il suo H-index è di 28 (Scopus).

Nel corso degli ultimi anni il Prof. Massimiliano è stato organizzatore di diversi *workshop* e congressi nazionali:

Workshop in Molecular Theories and Simulations (Gaeta – dal 2002 al 2008 e nel 2010)

TUMA – 2008 (L'Aquila, Giugno 2008)

TUMA – 2012 (Pescara, Luglio 2012)

Congresso Divisione Chimica-Teorica e Computazionale (Roma – Dicembre 2015)

E' stato inoltre membro del consiglio scientifico di:

Congresso Divisione Chimica-Teorica e Computazionale (Pisa – Ottobre 2016)

QUITEL 2016 di Torino (Luglio – 2016)

E' stato *Speaker* in molti congressi nazionali ed internazionali e *Invited Speaker* in diversi congressi tra cui:

19th IUPAC Conference in Physical Organic Chemistry in Physical Organic Chemistry

Faraday Discussions 2010 (Frontiers in Physical Organic Chemistry)

Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2011 (Divisione Didattica)

Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana 2017 (Divisione Ch. Teorica e Comput.)

Svolge normalmente attività di *referee* per le riviste:

Journal of Physical Chemistry

Physical Chemistry Chemical Physics

Inorganica Chimica Acta

Chemical Physics Letters

## PUBBLICAZIONI SELEZIONATE

1) M Aschi, M Attinà, F Cacace

An alternative route to electrophilic substitution. 2. Aromatic alkylation in the ion neutral complexes formed upon addition of gaseous arenium ions

Journal of the American Chemical Society 117 (51), 12832-12839, 1995

2) M Aschi, M Brönstrup, M Diefenbach, JN Harvey, D Schröder, H Schwarz

A gas-phase model for the Pt + -catalyzed coupling of methane and ammonia

Angewandte Chemie International Edition 37 (6), 829-832, 1998

3) M Aschi, M Attinà, F Cacace, G D'Arcangelo

Evaluation of the Lifetime of Gaseous Ion– Neutral Complexes. 1. A Chemical Activation Study

Journal of the American Chemical Society 120 (16), 3982-3987, 1998

4) M Aschi, JN Harvey, H Schwarz, W Koch

The Singlet and Triplet State of phenyl cation. A hybrid approach for locating Minimum Energy Crossing Points between non-interacting potential energy surfaces

Theoretical Chemistry Accounts 99, 95-95, 1998

5) JN Harvey, M Aschi

Spin-forbidden dehydrogenation of methoxy cation: a statistical view

Physical Chemistry Chemical Physics 1 (24), 5555-5563, 1999

6) PRP de Moraes, HV Linnert, M Aschi, JM Riveros

Experimental and theoretical characterization of long-lived triplet state CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>S<sup>+</sup> cations

Journal of the American Chemical Society 122 (41), 10133-10142, 2000

7) A Amadei, M D'Alessandro, M Aschi

Statistical mechanical modeling of chemical reactions in complex systems: the reaction free energy surface

The Journal of Physical Chemistry B 108 (41), 16250-16254, 2004

8) A Amadei, M D'Alessandro, M D'Abramo, M Aschi

Theoretical characterization of electronic states in interacting chemical systems

The Journal of Chemical Physics 130 (8), 084109, 2009

9) C Zazza, A Palma, A Amadei, N Sanna, S Tatoli, M Aschi

On the catalytic role of structural fluctuations in enzyme reactions: computational evidence on the formation of compound 0 in horseradish peroxidase

Faraday Discussions 145, 107-119, 2010

10) A Di Crescenzo, M Aschi, A Fontana

Toward a better understanding of steric stabilization when using block copolymers as stabilizers of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) aqueous di

Macromolecules 45 (19), 8043-8050, 2012

11) M D'Alessandro, M Aschi, C Mazzuca, A Palleschi, A Amadei

Theoretical modeling of UV-Vis absorption and emission spectra in liquid state systems including vibrational and conformational effects: The vertical absorption approximation

The Journal of Chemical Physics 139 (11), 114102, 2013

12) G Piacente, A Amadei, M D'Abramo, I Daidone, M Aschi

Theoretical-computational modeling of photo-induced charge separation spectra and charge recombination kinetics in solution

Physical Chemistry Chemical Physics 16 (38), 20624-20638, 2014

13) O Carrillo-Parramon, S Del Galdo, M Aschi, G Mancini, A Amadei, V Barone

Flexible and Comprehensive Implementation of MD-PMM Approach in a General and Robust Code

Journal of chemical theory and computation 13 (11), 5506-5514, 2017