

## Curriculum Vitae

### Informazioni personali

Dipartimento di Scienze Chimiche  
Università di Napoli *Federico II*

### Esperienze di Lavoro

- 07/2019 - presente | **RTD-A. RICERCATORE A TEMPO DETERMINATO** - tempo pieno (art. 24 c.3-a L. 240/10) nel SSD CHIM/02. Programma Operativo Nazionale (PON) Ricerca e Innovazione 2014-2020. Dipartimento di Scienze Chimiche. Università di Napoli *Federico II*, Napoli. Italia.
- 2015 - presente | **SVILUPPO DI SOFTWARE** Contributo ad un software open source: CHRONUSQ.
- 2013 - presente | **SVILUPPO DI SOFTWARE** Contributo ad un software commerciale: GAUSSIAN.
- 09/2018 - 06/2019 | **ASSEGNISTA DI RICERCA - POSTDOC** Titolo del progetto di ricerca: Studio di materiali polimerici nanostrutturati e sviluppo di nanotecnologie per applicazioni nel campo della sensoristica e dell'elettronica organica. Dipartimento di Scienze Chimiche. Università di Napoli *Federico II*, Napoli. Italia.
- 06/2014 - 08/2018 | **RESEARCH ASSOCIATE - POSTDOC** Department of Chemistry University of Washington, Seattle, WA. USA.

### Qualifiche e abilitazioni

- 09/2019 - 09/2025 | **ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE PROFESSORE DI II FASCIA** ai sensi dell'art. 16 della Legge n. 240/2010 nel settore concorsuale 03/A2 modelli e metodologie per le scienze chimiche, SSD CHIM/02.
- 09/2019 - 09/2025 | **ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE PROFESSORE DI II FASCIA** - ai sensi dell'art. 16 della Legge n. 240/2010 nel settore concorsuale 02/B2 fisica teorica della materia.
- 04/2021 - 09/2030 | **ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE PROFESSORE DI II FASCIA** - ai sensi dell'art. 16 della Legge n. 240/2010 nel settore concorsuale 03/B1 fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici.

### Istruzione

- 05/2014 | **DOTTORATO** in Scienze Chimiche. Giudizio: *Eccellente*. Università di Napoli *Federico II*, 2011-2014. *Titolo della Tesi*: Studio teorico per la spettroscopia risolta nel tempo e i processi di non-equilibrio.
- 10/2013 - 01/2014 | **VISITING PH.D STUDENT** Department of Chemistry, University of Washington, Seattle, WA, USA.
- 10/2010 | **LAUREA MAGISTRALE** in Scienze Chimiche, *Summa Cum Laude*. Università di Napoli *Federico II*. *Titolo della Tesi*: Un modello teorico per lo studio della fluorescenza risolta nel tempo.
- 10/2008 | **LAUREA TRIENNALE** in Chimica, *Summa Cum Laude*. Università di Napoli *Federico II*. *Titolo della Tesi*: Studio teorico della microsolvatazione dei metallo-complessi: il  $Co^{2+}$  in soluzione acquosa.

## Esperienze di Insegnamento

2021- 2022	<b>MEMBRO DEL COLLEGIO DEI DOCENTI DEL DOTTORATO</b> in Molecular Sciences for Earth and Space presso la Scuola Superiore Meridionale gestito dall'ufficio dottorati dell'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.
2020/21	<b>TITOLARE DELL'INSEGNAMENTO</b> del modulo (6 CFU) <i>Chimica Fisica Molecolare</i> del corso curriculare di Termodinamica dei Materiali per la laurea triennale in Scienze e Ingegneria dei Materiali presso l'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.
2020/21	<b>TITOLARE DELL'INSEGNAMENTO</b> del corso curriculare (6 CFU) <i>Metodi e Modelli per i Processi Fotoindotti</i> per la laurea magistrale in Scienze Chimiche presso l'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.
2020- 2021	<b>MEMBRO DEL COLLEGIO DEI DOCENTI DEL DOTTORATO</b> in Astrochimica presso la Scuola Normale Superiore, Pisa, Italia.
2019 - presente	<b>ASSISTENZA ALL'INSEGNAMENTO</b> corso di chimica Fisica I presso l'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.
2020 - presente	<b>ASSISTENZA ALL'INSEGNAMENTO</b> corso di chimica Fisica II presso l'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.
2018 - presente	<b>SUPERVISIONE TESI</b> Magistrali in Scienze Chimiche presso l'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia. Supervisione dei progetti di tesi di dottorato e di laurea di numerosi studenti (sviluppo di metodi teorici e computazionali per la dinamica ab-initio per i sistemi a trasferimento di carica fotoindotta, la fotofisica nella regione di Franck-Condon, motori molecolari fotoindotti, singlet fission).
09/2020	<b>TRAINING TRAMITE CORSO ONLINE</b> per lo sviluppo di pratiche di insegnamento di corsi di laboratorio per le materie scientifiche presso le Università. Organizzato dall'University of Amsterdam e riconosciuto dell' European Chemistry Thematic Network Association (ETCN) .
2019 - 2020	<b>ASSISTENZA ALL'INSEGNAMENTO</b> corso di chimica computazionale presso l'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.
Gennaio 2019	<b>CULTORE DELLA MATERIA</b> nell' ambito del settore scientifico disciplinare CHIM/02
Primavera 2017	<b>TITOLARE DELL'INSEGNAMENTO</b> del corso di chimica computazionale per la laurea triennale presso l'University of Washington, Seattle, WA. USA. Chemistry 465.
Primavera 2017	<b>TITOLARE DELL'INSEGNAMENTO</b> del corso di chimica computazionale per la scuola di dottorato presso l'University of Washington, Seattle, WA. USA. Chemistry 565.
06/2014 - 2018	<b>SUPERVISIONE TESI</b> presso l'University of Washington, Seattle, WA. USA. Supervisione dei progetti di tesi di dottorato di numerosi studenti (difetti e impurezze in semiconduttori, processi di diffusione di ioni, spettroscopia risolta nel tempo, quadratura numerica e teoria del funzionale della densità elettronica).
2011 - 2013	<b>ASSISTENZA ALL'INSEGNAMENTO</b> corso di chimica computazionale presso l'Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.

## Incarichi Istituzionali

04/2021 - presente	Rappresentante dei Ricercatori nella Giunta di Dipartimento, Dipartimento di Scienze Chimiche. Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.
01/2020 - presente	Responsabile Dipartimentale per le reti informatiche, Dipartimento di Scienze Chimiche. Università di Napoli <i>Federico II</i> , Napoli, Italia.

## Affiliazioni professionali e certificazioni

2014 - presente	American Chemical Society.
2010 - presente	Società Chimica Italiana.
10/2011	Abilitazione alla professione di Chimico.

## Scuole di Formazione

02/2021	Workshop “How to design a Massive Open Online Course (MOOC)”, organizzato nel framework del Progetto Europeo STEM-CPD@EUni project (2020-1-PL01-KA203-081802). Evento On-line (causa Emergenza SARS-COV2), University of Ljubljana, Slovenia.
09/2020	Training per lo sviluppo di pratiche di insegnamento di corsi di laboratorio per le materie scientifiche presso le Università. Organizzato dall’University of Amsterdam e riconosciuto dall’European Chemistry Thematic Network Association (ETCN).
05/2012	IX ETSF (European Theoretical Spectroscopy Facility) Young Researchers’ Meeting; Brussels, Belgio.
05-2011	Corso “Calcolo scientifico e tecnico in linguaggio Fortran95”. CASPUR (Consorzio interuniversitario per le applicazioni di supercalcolo per università e ricerca); Roma, Italia.

## Premi e riconoscimenti

2019	“Outstanding Reviewer for Physical Chemistry Chemical Physics 2019“. Menzione di Riconoscimento come Eccellente Revisore paritario (peer review) per la rivista internazionale Physical Chemistry Chemical Physics della Royal Society of Chemistry, UK.
09/2019	Premio “Eolo Scrocco 2019” per giovani ricercatori (under 35) per la ricerca originale, di rilevante interesse e riconosciuta importanza nell’area dei metodi teorici e degli approcci computazionali applicati alle scienze chimiche della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana.
06/2018	Premio dell’istituto Clean Energy dell’University of Washington per presentare i propri risultati scientifici. Seattle, U.S.A.
10/2017	Premio miglior poster del Journal of Chemical Physics. 1st Northwest Theoretical Chemistry Conference. Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA. USA.
05/2014	Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche con giudizio Eccellente. Università di Napoli <i>Federico II</i> . Italia.
06/2012	Premio dottorandi presso il NanomeetsBio@Nanomates workshop. Salerno, Italy.
2011-2013	Borsa di Studio del MIUR (Ministero dell’Istruzione, dell’Università e della Ricerca) per il conseguimento del titolo di Dottore di ricerca in Scienze Chimiche presso l’Università di Napoli <i>Federico II</i> (Primo classificato in graduatoria).
10/2010	Laurea Magistrale Magna cum Laude. Università di Napoli <i>Federico II</i> . Italia.
10/2008	Laurea triennale Magna cum Laude. Università di Napoli <i>Federico II</i> . Italia.

## Linee di Ricerca

- Modelli e metodologie per le scienze chimiche. Sviluppo di metodologie per lo studio della dinamica elettronica e nucleare basata su principi primi e dei fenomeni non adiabatici (i.e. dinamica Ehrenfest, surface hopping e accoppiamenti non adiabatici).
- Sviluppo di protocolli per la simulazione della foto reattività ultra veloce e della spettroscopia multidimensionale risolta nel tempo. Sviluppo di approcci multi scala e condizioni al contorno non-periodiche (non-PBCs), modelli del continuo polarizzabile (PCM, C-PCM), effetti di solvatazione con una formulazione dipendente dalla frequenza.
- Sviluppo di tecniche per la quadratura numerica per la teoria del funzionale della densità elettronica (DFT), in particolare per la densità elettronica non collineare in fenomeni relativistici nella teoria dipendente dal tempo DFT.
- Simulazione di spettroscopia ad alta risoluzione e femto-chimica nei nanomateriali e nel fotovoltaico.
- Simulazione di processi in fase condensata, microsolvatazione di sonde molecolari e bio-molecole.
- Sviluppo di software: GAUSSIAN e CHRONUSQ (<http://www.chronusquantum.org/>).

## Partecipazione a progetti di ricerca (ruolo)

07/2019 - Presente	Unità di ricerca del Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Napoli Federico II, Programma Operativo Nazionale (PON) Ricerca e Innovazione 2014-2020. "Ottenimento di sistemi nanostrutturati per produrre idrogeli per la solubilizzazione e rilascio di principi attivi idrofobici/idrofilici" (RTD-A).
2021 - Presente	Unità operativa locale del Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Napoli Federico II per l'European Project: "STEM Continuous Professional Development at European Universities" (RTD-A).
2019 - Presente	Progetto di ricerca e sviluppo tra Università Federico II e Gaussian Inc.: "Sviluppo, implementazione e applicazione di metodi per la spettroscopia vibrazionale" (RTD-A).
2017 - 2018	U.S. National Science Foundation (NSF) Grant No. DMR1719797: "University of Washington Molecular Engineering Materials Center MERSEC" (Post-Doc).
2016 - 2018	U.S. NSF Grant No. CHE-1565520: "Multidimensional Electronic Dynamics beyond the Dipole Approximation" (Post-Doc).
2016 - 2018	U.S. NSF Grant No. CHE-1464497: "Trap Assisted Dynamical Processes in Semiconductor Nanocrystals" (Post-Doc).
2014 - 2018	U.S. NSF Grant No. CHE-1265945: "First-Principles Excited State Electronic Dynamics" (Post-Doc).
2014 - 2017	U.S. NSF Grant No. DMR-1408617: "Theoretical and Experimental Ion Diffusion in II-VI Semiconductor Nanocrystals" (Post-Doc).
2014 - 2016	U.S. Department of Energy Grant No. DE-SC0006863: "Ab Initio Relativistic Electron Spin Dynamics" (Post-Doc).
2011 - 2014	Progetto di ricerca e sviluppo tra Università Federico II e Gaussian Inc.: "sviluppo, implementazione e applicazione di metodi per la dinamica molecolare ab-initio" (Ph. D.).
2013 - 2014	Unità di ricerca locale del Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Napoli Federico II, Programma di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN2015, 2010FM738P002): "Proprietà fotofisiche e fotochimiche di composti organici e di interesse biologico in soluzione e in sistemi organizzati" (Ph. D.).

## Attività Coordinative e Organizzative

- Co-Organizzatore del Winter Modeling Meeting 2019 presso il Centro Congressi dell'Università di Napoli *Federico II*, Napoli, Italia. 14 Febbraio 2019.
- Rappresentante eletto degli Assegnisti di Ricerca nel Consiglio di Dipartimento del Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Napoli *Federico II*, Napoli, Italia. Dal Febbraio 2019 (in carica).
- Volontario nell'organizzazione del congresso Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC) presso l'University of Washington, Seattle, WA, USA. Settembre 2016.
- Promozione dello studio delle materie scientifiche negli istituti superiori tramite *Le Giornate della Chimica* presso l'Università di Napoli *Federico II*, Napoli, Italia.

## Attività Editoriale di Revisione per Riviste (Fonte: Publons)

- Attività di revisore per riviste scientifiche di rilevanza internazionale:  
*The Journal of Chemical Physics Letters*, *RCS Advances*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, *New Journal of Chemistry*, *The European Physical Journal D*, *International Journal of Quantum Chemistry*, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, *Computation*.
- Membro del comitato dei revisori di *Applied Sciences* [https://www.mdpi.com/journal/applsci/submission\\_reviewers](https://www.mdpi.com/journal/applsci/submission_reviewers)

## **Riassunto delle Produzione Scientifica**

- 33 Pubblicazioni peer-reviewed (SCOPUS)
  - 870 Citazioni
  - 18 H-Index
- 29 Presentazioni Orali
  - 5 su invito come presentatore
  - 12 come presentatore
  - 12 come co-autore

## **Contributi a Software (Authorship)**

- CHRONUSQ, Beta 2.0.2 Version.2018.  
X. Li, E. F. Valeev, D. Williams-Young, **A. Petrone**, et. al.; <http://www.chronusquantum.org/>.
- GAUSSIAN G16 Version. M. J. Frisch, et al.; Gaussian Inc., Wallingford CT 2016.

## **Profili Accademici**

- ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2232-9934>
- RESEARCHERID: <http://www.researcherid.com/rid/O-7891-2017>
- GOOGLE SCHOLAR PROFILE:  
[https://scholar.google.it/citations?user=8Mi\\_5KsAAAAJ&hl=it&oi=ao](https://scholar.google.it/citations?user=8Mi_5KsAAAAJ&hl=it&oi=ao)
- LINKEDIN: <https://www.linkedin.com/in/alessio-petrone-03a81b132/>