

Curriculum vitae del dott. Alfonso Pedone (aggiornato al 23/05/2023)



Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche
Università di Modena e Reggio Emilia
Via G. Campi 103, 41125, Modena
Tel.: +39 0592058553

Email: alfonso.pedone@unimore.it

Web site: <https://sites.google.com/site/compmaterchem/home>

ResearchID: <http://www.researcherid.com/rid/C-6286-2014>

CARRIERA ACCADEMICA.

Il Prof. Alfonso Pedone è nato ad Atripalda (AV), il 26-06-1980. Nel luglio del 2004 ha conseguito la laurea in Chimica presso l'università di Modena e Reggio Emilia con il massimo dei voti (110/110 e lode). Titolo della tesi: *Sviluppo di algoritmi per la razionalizzazione di dati provenienti da simulazioni di dinamica molecolare*. Nel febbraio del 2008 ha ottenuto il dottorato di ricerca in Chimica presso lo stesso ateneo, Titolo della tesi: *Computational modeling of physical-chemical properties of inorganic amorphous solids..* Relatori: Prof. M.C. Menziani e Prof. U. Segre.

Aprile 2008-Aprile 2009: Assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Modena e Reggio Emilia. Titolo dell'attività di ricerca: *'Proprietà meccaniche e spettroscopiche di vetri silicatici per applicazioni biomediche mediante metodi di modellizzazione computazionale'*. Finanziato dalla Fondazione Cassa di Risparmio di Modena.

Maggio 2009-Dicembre 2010: Ricercatore a contratto alla Scuola Normale Superiore di Pisa, contratto di ricerca biennale in chimica teorica e computazionale finanziato da Telecom Italia dal titolo: *'Telecom Italian Fellowship at Scuola Normale Superiore'*.

Dal 20 dicembre 2010 al 10 giugno 2015 è stato ricercatore universitario confermato nel settore disciplinare CHIM03 presso il dipartimento di Chimica dell'università di Modena e Reggio Emilia.

Dall'11/06/2015 al 30/10/2015 è stato ricercatore universitario confermato nel settore disciplinare CHIM02 presso il dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'università di Modena e Reggio Emilia.

Dal 31/10/2015 ad oggi è professore associato nel settore disciplinare CHIM02 presso il dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'università di Modena e Reggio Emilia.

Ha trascorso periodi di studio presso istituti di ricerca italiani e stranieri, in particolare:

- **Maggio 2005.** Visiting Scientist presso l'università di Torino sotto la supervisione del Prof. Piero Ugliengo. In tale periodo ha iniziato ad occuparsi della messa a punto di potenziali empirici classici da dati *ab initio* e alla simulazione di biovetri con approcci di meccanica quantistica e meccanica molecolare.
- **Settembre- Dicembre 2006.** Visiting Scientist presso Alfred University, Alfred, New York, sotto la supervisione del Professore Alastair N. Cormack. In tale periodo ha lavorato ad un progetto intitolato: *'Rational Design of new glasses and glass-ceramics with improved bio-mechanical properties'* parzialmente supportato dall' International Materials Institute for New Functionality in Glass (IMI-NFG), Lehigh University, Bethlehem, PA (USA). (<http://www.lehigh.edu/imi/RESpotlightPedone.htm>)
- **Maggio 2008.** Visiting Scientist presso l'università Federico II di Napoli sotto la supervisione del Prof. Vincenzo Barone. In tale periodo ha iniziato ad occuparsi della simulazione di parametri NMR di zeoliti, silicati cristallini ed amorfi con tecniche di meccanica quantistica: Teoria Hartree Fock e metodi di Density Functional Theory.

- **Maggio 2013.** Visiting Scientist presso l'Interdisciplinary Department on Molecular Systems and Materials dell'istituto IRAMIS al Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA) in Saclay, France.
- **Febbraio 2015.** Visiting Scientist presso The School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary University College of London, UK.
- **Giugno 2016.** Visiting Scientist presso 'L'école Nationale Supérieure de Chimie de Paris, Chemie ParisTech, FR.

ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE

2012. Ha conseguito l'abilitazione da Professore associato nei settori **03/A2** – Modelli e metodologie per le scienze chimiche e **03/B1** – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici.

2013. Ha conseguito l'abilitazione da Professore associato nei settori **03/A2** – Modelli e metodologie per le scienze chimiche e **03/B1** – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici.

2017. Ha conseguito l'abilitazione da Professore ordinario nel settore **03/A2** – Modelli e metodologie per le scienze chimiche.

2020. Ha conseguito l'abilitazione da Professore ordinario nel settore **03/B1** – Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici.

2022. Ha rinnovato l'abilitazione da Professore ordinario nel settore **03/A2** – Modelli e metodologie per le scienze chimiche.

ATTIVITA' DIDATTICA

- Titolare del corso di 'Chimica Fisica 1' del corso di laurea triennale in Chimica. (9CFU – 72 ore di lezione) dall'anno accademico 2015/2016 ad oggi.
- Titolare del modulo A (Spettroscopia Molecolare, 6CFU di cui 1 di lab. – 50 ore di lezione) del corso di 'Chimica Fisica e Spettroscopia' del corso di laurea magistrale in Scienze Chimiche dall'anno accademico 2016/2017 ad oggi.
- Titolare del corso di 'Chimica Generale' del corso di laurea in Scienze Naturali. (9CFU – 84 ore di lezione di cui 20 di laboratorio) dall'anno accademico 2011/2012 all'a.a. 2014/2015
- Titolare del corso 'Methods in modelling and Multiscale Simulations' della scuola di dottorato 'Multiscale Modelling, Computational Simulations and Characterization in Materials and Life Science' dell'Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia. (4 crediti – 16 ore) degli anni accademici 2011/2012 e 2012/2013.
- E' stato titolare del corso 'Chimica Inorganica per l'ambiente' del corso di laurea magistrale Scienze per l'ambiente ed il territorio (A.A. 2010/2011). Università di Modena e Reggio Emilia. (6CFU – 48 ore di lezione)
- Assistenza al corso di 'Modellistica Computazionale di Bio e Nano sistemi' per chimici, fisici e biologi alla Classe di Scienze, Scuola Normale Superiore di Pisa (A.A. 2009/2010).
- Assistenza Laboratorio di Chimica dei materiali inorganici (A.A. 2004/2005, 2005/2006 e 2007/2008) del corso di laurea in Chimica. Dipartimento di Chimica. Università di Modena e Reggio Emilia.
- Assistenza al laboratorio del corso di Modellazione su base atomistica (A.A. 2005/2006 e 2006/2007). Corso di laurea in Progettazione e sviluppo di nuovi materiali. Ingegneria dei Materiali. Università di Modena e Reggio Emilia.
- Settembre 2008-Febbraio 2009. Ciclo di 8 seminari agli studenti e professori delle scuole medie secondarie all'interno del progetto Lauree Scientifiche. Titolo dei seminari: '*La chimica al computer*'

PARTECIPAZIONE E COORDINAMENTO DEL COLLEGIO DEI DOCENTI DI SCUOLE DI DOTTORATO.

- Scuola di dottorato "M2SCS" - *Multiscale Modelling, Computational, Simulations and Characterization in Material & Life Sciences*. Dipartimento di Chimica dell'università di Modena e Reggio Emilia. Date: 20-12-2010 al 31-12-2013.
- Scuola di Dottorato "M3ES" *Models and Methods for Materials and Environmental Sciences*. Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'università di Modena e Reggio Emilia. Date: 1-01-2014 al 31-12-2014 e dal 1-11-2015 ad oggi.
- Coordinatore della Scuola di Dottorato "M3ES" *Models and Methods for Materials and Environmental Sciences*. Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'università di Modena e Reggio Emilia. Triennio 2019-2022

ATTIVITA' DI FORMAZIONE DI GIOVANI RICERCATORI.

- **2012-2014.** Tutore di una studentessa di dottorato, Dott.ssa. Elisa Gambuzzi. Titolo del progetto di dottorato: *'Computational Modeling of Oxide Glasses'*.
- **2012-2014.** Co-Tutore di uno studente di dottorato, Dott. Davide Presti. Titolo del progetto di dottorato: *'Computational strategies for the study of pharmaceutical molecular crystals'*
- **2013-2015.** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dott. Francesco Muniz Miranda. Titolo del progetto di ricerca: *'Computational investigation of optoelectronic properties of organically protected gold nanoclusters'*.
- **2014-2016.** Co-tutore di uno studente di dottorato, Dott. Tavanti Francesco. Titolo del progetto di dottorato: *'Computational Modeling of Nanoparticle-Protein interactions'*.
- **2015-2016.** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dott.ssa Elisa Gambuzzi. Titolo del progetto di ricerca: *'Development and application of new computational protocols for the investigation of hybrid nanomaterials.'*
- **2016-2017** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dott. Davide Presti. Titolo del progetto di ricerca: *Ruolo dei fillosilicati modulari per la cattura e lo stoccaggio di CO₂: uno studio sperimentale e computazionale.*
- **2016-2017** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dott. Francesco Muniz Miranda. Titolo del progetto di ricerca: *'Computational investigation of optoelectronic properties of organically protected gold nanoclusters'*
- **2017-2019.** Co-Tutore di uno studente di dottorato, Dott. Luca Brugnoli. Titolo del progetto di dottorato: *'Computational study of fuel cell components'*.
- **2017-2018** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dott.ssa Mariagrazia Fortino. Titolo del progetto di ricerca: *'Computational investigation of the spectroscopic properties of organic molecules used in the hybrid-photovoltaic cells'*
- **2019-2022** Supervisor di uno studente di dottorato, Dott.ssa Federica Lodesani. Titolo del progetto di dottorato: *'Computer Simulation of nucleation and crystallization of silicate glasses'. Position Granted by AGC Inc.*
- **2020-2023** Supervisor di uno studente di dottorato, Dott. Marco Bertani. Titolo del progetto di dottorato: *'Exploiting machine learning techniques in computational simulations of oxide glasses.'*
- **2020-2022.** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dr. Luca Brugnoli. Title of the project: *Development of ReaxFF for Ceria/Silica interactions.*
- **2022-2025** Supervisor di uno studente di dottorato, Dott.ssa Annalisa Pallini. Titolo del progetto di dottorato: *'Understanding Composition-Structure-Property Relationships to Design Ultra Strong AluminoSilicate Glasses.'*

- **2022-2023.** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dott.ssa Federica Lodesani. Titolo progetto '*Studio del meccanismo di nucleazione e cristallizzazione in silicati fusi*'.
- **2023-2025.** Supervisor di un assegnista di ricerca, Dr. Marco Bertani. Titolo progetto '*Verso la comprensione delle relazioni struttura-conduttività in elettroliti solidi amorfi per batterie a stato solido di nuova generazione*'.

PREMI

- Premio del Rotary Club di Modena intitolato '*I migliori Cervelli scientifici nel campo della Chimica, Fisica e Matematica*'. Marzo 2005
- Premio '*Primo Levi 2006*' rilasciato dalla Società Chimica Italiana come Miglior giovane ricercatore in Chimica
- Premio come **migliore poster** presentato al workshop 'Winter modelling 2010' titolo del poster: '*Modeling Optical Properties of Fluorophores in different Environments*'.
- Premio come **migliore poster** presentato al congresso di Chimica Fisica 2010, titolo del poster: '*Absorption and Emission Spectra of Fluorophores encapsulated in nanoparticles*'.
- Premio internazionale '**Vincenzo Caglioti**' 2011 rilasciato dall'Accademia Nazionale dei Lincei.
- Premio '**Eolo Scrocco 2012**' rilasciato dalla divisione di chimica teorica e computazionale della Società Chimica Italiana.
- Premio '**Roetti**' **2017** rilasciato dalla divisione di chimica teorica e computazionale della Società Chimica Italiana.

ADESIONE A SOCIETA' SCIENTIFICHE

- Membro della Società Chimica Italiana (SCI), divisione di chimica teorica e computazionale.
- E' stato eletto nel consiglio direttivo della divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI per il triennio 2014-2016.
- Membro del Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali. (INSTM)
- Membro della rete 'Virtual Integrated Laboratory for Large-scale Applications in a Geographically distributed Environment' (VILLAGE, <http://village.unina.it/>), una rete virtuale tra diversi laboratori di calcolo per l'High Performance Computing.
- Membro del Consorzio Interuniversitario per lo sviluppo dei Sistemi di grandi Interfasi.
- Membro del nodo CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire) della Scuola Normale Superiore di Pisa.

PARTECIPAZIONE A COMITATI SCIENTIFICI/ORGANIZZATIVI DI CONFERENZE/WOKSHOP/CONGRESSI

- Organizzatore della ottava edizione del workshop '**Winter Modeling**', 13-14 Marzo 2014, Modena. Lo scopo del workshop è quello di riunire ricercatori di fama internazionale con ricercatori giovani.
- Membro del comitato scientifico del XXV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana – Divisione di Chimica Teorica e Computazionale, Rende (CS), 7-12 Settembre 2014.
- Membro del comitato scientifico del III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI, Roma (RM), 7-12 Settembre 2015

- Membro del comitato scientifico del IV Congresso Nazionale Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI, Pisa (Pi), 3-5 Ottobre 2016.
- Review editor della rivista open access *Frontiers in Materials –Section Glass Science*.
- Guest editor di *International Journal of Applied Glass Science* per la special Issue ‘Predicting Glass Structure, Properties and Behaviour: advancements in experimental and computational techniques.’ Deadline Luglio 2022.
- Membro del comitato scientifico del XIII Convegno Nazionale sulla Scienza e Tecnologia dei Materiali intitolato ‘Advanced Materials and Green Processes for a Sustainable Society’. Chair della sessione "Material modelling: data sources and computational methods". Sestriere (Italy) 23-26 Gennaio 2022.
- Membro del comitato scientifico e Chair del Symposium ‘Atomistic Simulations and Predictive Modeling of Glasses’ 2022 Glass and Optical Materials Division (GOMD) Meeting of the American Ceramic Society, 22-26 Maggio Baltimore, MD (USA).
- Membro del comitato scientifico e Chair del Symposium Computational Glass Science del 26° International Congress on Glass, Berlino (Germania), 3-8 Luglio 2022
- Comitato organizzatore del VII congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana. Modena 21-22 Settembre 2022
- Membro del comitato scientifico e Chair del Symposium ‘Atomistic Simulations and Predictive Modeling of Glasses’ 2023 Glass and Optical Materials Division (GOMD) Meeting of the American Ceramic Society, 4-9 Giugno New Orleans, LA (USA).

ATTIVITA' ORGANIZZATIVA ALL'INTERNO DI UNIMORE

- Membro Commissione Qualità del dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dal 2016 al 2022.
- Coordinatore della Scuola di Dottorato “*M3ES*” *Models and Methods for Materials and Environmental Sciences*. Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell’università di Modena e Reggio Emilia. Da Novembre 2019 ad oggi
- Membro dell’OSSERVATORIO ALLA RICERCA DI ATENEIO come referente dell’area CHIMICA dal 2019 ad oggi.
- Referente VQR 2010-2014 e 2015-2019 per il dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche.

FINANZIAMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- **Progetto COFIN2006** (prot. 2006032335) dal titolo: Fenomeni d’interfaccia in materiali nanostrutturati biocompatibili a base di silice posti a contatto con sistemi biologici. (Durata 24 mesi) Responsabile Prof. C. Morterra dell’Università di Torino. (Ruolo ricoperto: componente di unità operativa)
- **Progetto COFIN2006** (prot. 2006033728) dal titolo: Strategie computazionali integrate per l’interpretazione di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi nanostrutturali tramite sonde spettroscopicamente attive. (Durata 24 mesi) Responsabile Prof. V. Barone, Università Federico II di Napoli. (Ruolo ricoperto: componente di unità operativa)
- **Progetto PRIN2008** (prot. 2008J9RNB3) dal titolo: Integrazione Temporale per l’Evoluzione Molecolare’. (Durata 24 mesi) Responsabile Prof. A. Polimeno, Università di Padova. (Ruolo ricoperto: componente di unità operativa)
- **COST ACTION CM1002 – CODECS: Converged Distributed Environment for Computational Spectroscopy** (Durata 22/07/2010 – 24/05/2014). Responsabile Prof. Vincenzo Barone, Scuola Normale Superiore di Pisa. (Ruolo ricoperto: componente di unità operativa)

- **Progetto PRIN 2010** (prot. 2010C4R8M8) dal titolo ORGANIZZAZIONE FUNZIONALE A LIVELLO NANOSCOPICO DI (BIO)MOLECOLE E IBRIDI PER APPLICAZIONI NEL CAMPO DELLA SENSORISTICA, DELLA MEDICINA E DELLE BIOTECNOLOGIE. (Durata 36 mesi) Responsabile Prof. A. Agostiano, Università degli Studi di Bari. (Ruolo ricoperto: componente di unità operativa, budget 80.000 €)
- **Progetto FIRB 2012** (prot. 2012RBFR1248UI) dal titolo Nuove Strategie Teorico / Computazionali Multiscala per la Progettazione di Composti Ibridi Organico - Inorganici Foto e Termo Responsivi per Circuiti Nanoelettronici. (Durata 36 mesi) Coordinatore Nazionale Dott. Mirco Zerbetto dell'Università degli studi di Padova. (Ruolo ricoperto: coordinatore di unità operativa locale budget: 313.000 €)
- **Progetto Bilaterale Italia-Francia Galileo 2012** dell'università Italo-Francese per la mobilità dei giovani ricercatori. titolo del progetto: Investigation of Mo-99 environment in Nuclear Waste Glasses: A synergic computational and experimental approach. (Ruolo ricoperto: coordinatore, budget 2900 €)
- **PRIN 2015** (prot. 2015XBZ5YA_002) Titolo: Toward quantum photovoltaic: ultrafast energy and charge transport in hybrid nanomaterials (Durata: 2016-2018, Ruolo: coordinatore locale, budget: 40.167 €)
- **PROGETTO INDUSTRIALE finanziato da Ashai Glass Company** (Multinazionale Giapponese) per lo sviluppo ed applicazione di metodi computazionali per studiare materiali vetrosi e vetroceramici. Il finanziamento è iniziato nel settembre del 2018 e si è protratto sino ad ora con importo di 206000€.
- **1 Progetto NVIDIA Academic Hardware Grant.** Titolo del progetto 'Neural Networks for Atomistic Simulations of Oxide Based Materials'. Donazione di Scheda Grafica NVIDIA A100 for PCIe per datacenter del valore di 14000 euro.
- Afferente al progetto PNRR 'ECOSYSTEM FOR SUSTAINABLE TRANSITION IN EMILIA-ROMAGNA' Spoke 6 - Ecological transition based on HPC and Data Technology.
- **PROGETTO INDUSTRIALE finanziato da SCHOTT Glass Company** (Multinazionale Tedesca) per lo sviluppo ed applicazione di potenziali interatomici per vetri alluminosilicatici. 1/11/2022 – 31/10/2023 Budget 36000€.
- PNRR 'ECOSYSTEM FOR SUSTAINABLE TRANSITION IN EMILIA-ROMAGNA' Spoke 6 - Ecological transition based on HPC and Data Technology (Membro dello Spoke Budget personale 72 k€).

FINANZIAMENTI LOCALI E REGIONALI

- **Progetto Interno Scuola Normale Superiore di Pisa** destinato a giovani ricercatori (GR PEDONE2010) dal titolo: Embedded Approaches to Evaluate the Magnetic Parameters of Free Radicals in Condensed Phases. (coordinatore, budget: 5500 €)
- **Progetto Regionale Emilia Romagna SPINNER 2013** per i dottorati di Ricerca. Titolo del progetto: 'Ottimizzazione delle forme cristalline di farmaci in relazione all'attività, la biodisponibilità, brevettabilità e alla progettazione di polimorfi solvatati e co-cristalli con metodi a basso impatto ambientale'. (durata del progetto 36 mesi, ruolo: co-investigatore, budget: 48750 €)
- **Finanziamento della Fondazione Cassa di Risparmio di Modena** attraverso il bando congressi per l'organizzazione del workshop di chimica teorica e computazionale Winter Modeling 2014. (Role: Coordinator, budget: 3910 €)
- **E4 Computer Engineering Spa**, Contratto di Partecipazione al Workshop Winter Modeling 2014 (900 €).

- **Linea di Ricerca di Ateneo UNIMORE** – Strategic-Nano - “Il ruolo dello stato di ossidazione del Cerio in vetri bioattivi utilizzati come biomateriali di terza generazione” - Anno 2013-2014 Coordinatore: Gianluca Malavasi (ruolo: partecipante, budget complessivo 50.000 €)
- **Progetto FAR2014 di Ateneo UNIMORE:** Ruolo dei fillosilicati modulari per la cattura e lo stoccaggio di CO₂: uno studio sperimentale e computazionale. (ruolo: principal investigator, budget complessivo 28.000 €)
- **Progetto FAR2016 di Ateneo UNIMORE:** Innovative (oxide-based) materials and methods for fuel cell electrodes implementation. (ruolo: partecipante, budget complessivo 80.000 €)
- **Progetto FAR2020 di Ateneo UNIMORE** per l’acquisto di grande strumentazione HPC (ruolo, coordinatore, budget complessivo 45 000 €)

PARTECIPAZIONE A CONGRESSI/WORKSHOP COME ORATORE

- XXXIII Congresso della Società Chimica Italiana- sessione Chimica Fisica, Siena (Italy) 20-24 June 2005. “*Interstitial statistics in Amorphous Solids: a Computational Study*”
- XXXV Congresso della Società Chimica Italiana- sessione Chimica Fisica, Gallipoli (Italy) 17-22 June 2006. “*Insight into elastic properties of alkali silicate glasses: prediction and interpretation through atomistic simulations techniques*”
- XXI International Congress on Glass ICG2007 Strasbourg- France 1-7 July 2007. ‘*Effect of MgO replacement for CaO in soda lime glasses: a computational study*’
- EUROMAT2009, Glasgow, UK, 7-10 Settembre 2009. *An in silico Spectroscopic Study of the 45S5 Bioglass.*
- Workshop CSGI 2010 , Chianciano Terme (Siena), 28 Giugno-1 Luglio 2010. *Modelling Optical Properties of Fluorophores Embedded in different Environments.*
- ElecMol 2014, ‘7th International Conference on Molecular Electronics’ Strasburgo, Francia 24-29 Agosto 2014. *Effect of the Organic Ligands on the Optoelectronic Properties of Undecagold Nanoclusters.*
- XXV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Rende (CS), Italia 7-12 Settembre 2014. *Effect of the Organic Ligands on the Optoelectronic Properties of Undecagold Nanoclusters.*

PARTECIPAZIONE A CONGRESSI/WORKSHOP COME ORATORE INVITATO.

- VIII Convention Nazionale Ambiente Ricerca Giovani (ARG) Ferrara 19-23 Novembre 2007. ‘*A new Self-Consistent Interatomic potential model for oxides, silicates and silica based glasses*’
- Giornata della Chimica. Organizzata dalla società chimica italiana sezione dell’emilia romagna. Modena, 18 January 2008 ‘*A new Self-Consistent Interatomic potential model for oxides, silicates and silica based glasses*’
- 37° Congresso di Chimica-Fisica della Società Chimica Italiana, Camogli (Genova) 24-29 Febbraio 2008. ‘*Computer Simulations of Chemical Physical Properties of Amorphous Inorganic Materials*’
- Seminario al centro di eccellenza S3, dipartimento di Fisica, Università di Modena e Reggio Emilia. 13-03-2008 ‘*A new Self-Consistent Interatomic potential model for oxides, silicates and silica based glasses*’
- Workshop winter Modelling 2011, Scuola Normale Superiore, Pisa, 13-14 Gennaio 2011. *Modeling of Novel Nanostructured Materials for Biomedical Applications.*
- Workshop ‘Brittle Fracture at the atomic scale’. CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland.

- 16-19 Maggio 2011.
- XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Lecce, 11-16 Settembre 2011 '*The Vincenzo Caglioti Prize and Computational Chemistry*'
 - Giornata della Chimica. Organizzata dalla società chimica italiana sezione dell'emilia romagna. Modena, 28 October 2011 '*Il ruolo del chimico nella ricerca: la mia esperienza*'
 - Workshop Meeting of the COST action CODECS 'Holistic Computational Spectroscopy: innovative concepts, modern tools, strategic vision and challenges', Pisa, 16-18 Novembre 2012. Titolo della presentazione '*Optical Properties of Dye-Doped Silica Nanoparticles via QM/MM Simulations*'
 - Workshop winter Modelling 2012, Scuola Normale Superiore, Pisa, 14 Febbraio 2012. *Toward The Realistic Modelling of Dye-Doped Silica Nanoparticles.*
 - CECAM Conference: "Energy from the Sun: Computational Chemists and Physicists Take up the Challenge" Chia Laguna resort, Cagliari, Italia, 10-14 Settembre 2012 titolo della presentazione: *Excited state properties of solar energy conversion devices based on dye-doped silica nano-structures.*
 - 2° Congresso della divisione della chimica teorica e computazionale, Padova, Italia, 20-22 febbraio 2013. Titolo della presentazione: *Computational simulations of solid state NMR spectra: a new era in structure determination of oxide glasses.*
 - Seminario alla Scuola di Dottorato di Chimica dell'università di Padova, 06/06/2013. *Excited state properties of dye-doped silica nano-structures.*
 - Kyenote al NIS colloquia 'Advances in Biomaterials: combining simulations with experiments' 27-28 Novembre 2013, Torino. *Computational NMR spectroscopy applied to Bioglasses*
 - Workshop Winter Modeling, VIII edition, Scuola Normale Superiore, Pisa, 1-2 December 2014 Structural and Optical Properties of Organically Protected Gold and Silver Nanoclusters
 - Seminario alla The School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary University College of London, UK. Data: 04/02/2015 Titolo: *Toward the realistic modeling of dye-doped silica nanoparticles and organically protected metal nanoclusters.*
 - 2nd International Workshop on Challenges of Atomistic Simulations of Glasses and Amorphous Materials. Wuhan, China, June 22-24, 2015, Titolo: *Molecular Dynamics Simulations of uniaxial tensile tests of silica based glasses: from bulk to nanowires.*
 - Workshop 'Nanostructured Metal Optics: from Theory to Enhanced Spectroscopies, Sensing, Imaging' Scuola Normale Superiore, Pisa, 1 April 2016. Titolo della Presentazione: '*Molecular Modelling of metal nanoclusters and nanoparticles: from TDDFT calculations to Coarse grained MD simulations*'
 - Seminario Sulle Frontiere della Chimica alla Scuola Normale Superiore di Pisa. Pisa, 25/05/2016. Titolo del seminario: '*Molecular Dynamics Simulations of Oxide Glass Structures and Properties*'.
 - Plenary Lecture al workshop Excited States in Complex Systems, ChemieParisTech, 21-23 Novembre 2016. Titolo della presentazione: '*Excited State Dynamics of large-size fluorophores in water solvent and embedded in silica nanoparticles*'.
 - XXVI Congresso della Società Chimica Italiana, Paestum (SA), 10-14 September 2017. Title: From First-Principle Chemical Shift and EFG Tensors Calculations to Solid-State 1D and 2D NMR Spectra Simulations of Complex Systems.
 - Seminar at the Nano-Science Center of the University of Copenhagen, 13 October 2017. Title: *Computational NMR Spectroscopy applied to Material Science.*
 - Plenary Lecture at the 2018 Glass and Optical Materials Division (GOMD) Meeting of the American Ceramic Society, 20-24 May San Antonio, Texas (USA). Title: *Bioactive Glass Structure determination via Molecular Dynamics Simulations and NMR-DFT calculations.*

- 25th International Congress on Glass (ICG2019). Title: Molecular Dynamics Simulations and DFT-GIPAW calculations of sodium borosilicate glasses. Boston, June 9-14, 2019.
- Seminario alla conferenza GIDRM 2019 intitolata ‘Computational methods and NMR Spectroscopy: a powerful synergy for chemistry, materials science and biology. Titolo della presentazione: Computational NMR spectroscopy as a new tool to probe materials structure. 10 December 2019, Pisa.
- Seminario presso Scuola Normale Superiore di Pisa, 16/07/2021. Titolo: ‘Molecular Modelling of Bioactive Glasses’. (online)
- KeyNote Lecture al XXVII Congresso della Società Chimica Italiana. Titolo ‘Exploiting Machine Learning Methods in Atomistic Simulations of Oxide Glasses’. 17 Settembre 2021. (Online)
- Seminario presso The State University of New Jersey, Department of Materials Science and Engineering (New Jersey). Titolo: New Advances in Atomistic Modelling of Oxide Glasses 7 Dicembre 2021. (online)
- Keynote Lecture al 26° International Congress on Glass. Berlino 3-8 Luglio 2022. Titolo: ‘*Predicting Structure Properties and Behavior of Oxide Glasses Through Molecular Dynamics Simulations*’.
- Keynote Lecture al 2° ELSICS Workshop ‘Energy Landscapes and Structure of Ion Conducting Solids’, Gottingen 26-28 Settembre 2022. Titolo: *Ionic Transport in Oxide Glasses*
- Invited talk al ‘Winter Modeling 2023 - New frontiers in astrochemistry and astrobiology’, Napoli, 23-24 Febbraio 2023. Titolo: *Modelling Structure and Properties of Oxide Glasses: the role of the interatomic potentials models*.
- Invited Lecture at the Symposium ‘Glass and Interactions with Its Environment’ 2023 Glass and Optical Materials Division (GOMD) Meeting of the American Ceramic Society, 4-9 Giugno New Orleans, LA (USA). Titolo: *Unravelling the Structural Role of Doping Cations in Bioactive Glasses through Molecular Dynamics Simulations*.

INDICI BIBLIOMETRICI.

L'attività scientifica del Prof. Pedone e la sua leadership nel campo della chimica teorica e computazionale è testimoniata dal gran numero di contributi alle più importanti riviste scientifiche in chimica, con particolare riferimento alla chimica inorganica, fisica, teorica e dei materiali. E' co-autore di più di **140** lavori pubblicati su riviste internazionali con peer-review e **7** capitoli di libri. Inoltre, ha eseguito più di 30 comunicazioni orali su invito in istituzioni italiane e straniere. I suoi lavori hanno ricevuto più di **4700** citazioni sul database Scopus (>5600 su Google Scholar Citations) ed ha **h-index = 40** (41, Google Scholar Citations).

Interessi scientifici e attività di ricerca.

Il candidato conduce attività di ricerca nel campo delle simulazioni al computer usando metodi basati sulla meccanica classica e quantistica e loro integrazioni in un approccio a multiscale applicate allo studio della struttura e proprietà di materiali inorganici, cristalli molecolari organici e nanomateriali per applicazioni nel campo della nano-medicina, nanoelettronica, della conversione di energia, confinamento dei rifiuti radioattivi e nell'edilizia. Studia la Reattività chimica di catalizzatori a base di ossidi riducenti, la durabilità chimica, nucleazione e cristallizzazione, e le relazioni composizione-struttura-proprietà in sistemi vetrosi a base ossidica. Si interessa di spettroscopia computazionale in generale, vale a dire dello sviluppo di protocolli e codici per la simulazione di spettri NMR nello stato solido, al calcolo dei parametri NMR ed EPR di radicali organici incorporati in diversi ambienti ed alla simulazione di spettri UV-Vis di molecole organiche in soluzione ed inglobate in matrici inorganiche.

Il dominio di competenza del candidato comprende: i) Teoria del funzionale densità (DFT) e la sua estensione temporale (TD-DFT); ii) Simulazioni di dinamica molecolare classica, Car-Parrinello e metadinamica; iii) Sviluppo di parametri per campo di forza empirici e basati su Machine Learning; iv) Metodi ibridi QM/QM e QM/MM ; v) Spettroscopia computazionale. vi) Dinamica Molecolare Coarse –Grain.

Elenco Pubblicazioni Scientifiche su riviste dotate di IF.

		Quartile (Scopus)
1	Lusvardi, G.; Malavasi, G.; Menabue, L.; Menziani, M. C. Pedone, A. and Segre, U.. <i>A Computational Tool for the Prediction of Crystalline Phases Obtained from Controlled Crystallization of Glasses.</i> J Phys. Chem. B (2005), 109(46), 21586-21592, DOI: 10.1021/jp0546857	Q1
2	Malavasi, G.; Menziani, M. C.; Pedone, A. and Segre, U. <i>Void size distribution in MD-modelled silica glass structures.</i> J. Non-Crys. Sol. (2006), 352(3), 285-296. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2005.11.022	Q1
3	Pedone, A. ; Malavasi, G.; Menziani, M. C.; Cormack, A. N.; Segre, U. <i>A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica Based Glasses.</i> J. Phys. Chem. B (2006) 110, 11780-11795. DOI: 10.102/jp0611018	Q1
4	Lusvardi, G; Malavasi, G; Menabue, L.; Menziani, M. C. Pedone, A. and Segre, U. <i>Density of multicomponent silica-based potential bioglasses: quantitative structure-property relationships (QSPR) analysis.</i> J. Eur. Cer. Soc. 27 (2007) 499-504. DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2006.04.067	Q1
5	Malavasi, G; Pedone A. and Menziani M. C. <i>Towards a quantitative rationalization of multicomponent glass properties by means of Molecular Dynamics Simulations.</i> Molecular Simulation (2006) 32(10), 1045-1055. DOI: 10.1080/08927020600932793	Q2
6	Malavasi, G.; Menziani, M. C.; Pedone, A. ; Civalleri, B., Corno, M. and Ugliengo P. <i>A computational multiscale strategy to the study of amorphous materials.</i> Theor. Chem. Acc. 2007, 117(5-6), 933-942. 10.1007/s00214-006-0214-1	Q3
7	Pedone, A. ; Malavasi, G., Cormack, A. N., Segre, U. and Menziani, M. C.. <i>Insight into elastic properties of binary alkali-silicate glasses; prediction and interpretation through atomistic simulation techniques.</i> Chem. Mater. 2007, 19(13),3144-3154. DOI: 10.1021/cm062619r	Q1
8	Pedone, A. ; Corno, M.; Civalleri, B.; Malavasi, G., Menziani, M. C.; Segre, U. and Ugliengo P. <i>An ab initio parameterized interatomic force field for Hydroxyapatite.</i> J. Mater. Chemistry 2007, 17, 2061-2068 DOI:1039/b617858h	Q1
9	Malavasi, G.; Lusvardi, G.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Doppiaggi, M.; Gualtieri, A.; Menabue, L.. <i>Crystallization Kinetics of Bioactive Glasses in the ZnO-Na₂O-CaO-SiO₂ System.</i> J. Phys. Chem A (2007) 111(34), 8401-8408 DOI: 10.1021/jp071528u	Q2
10	Linati, L.; Lusvardi, G.; Malavasi, G.; Menabue, L., Menziani, M. C.; Mustarelli, P., Pedone, A and Segre U. <i>Medium range order in phospho-silicate bioactive glasses: insights from MAS-NMR spectra, Chemical durability experiments and</i>	Q1

	<i>Molecular Dynamics Simulations. J. Non- Cryst. Sol.</i> (2008) 354, 84-89 DOI: 10.1016	
11	Pedone, A. ; Malavasi, G.; Menziani, M. C.; Segre, U.; Musso, F.; Corno, M.; Civalleri, B.; Ugliengo, P. <i>FFSiOH: a new Force Fields for Silica Polymorphs and their Hydroxylated Surfaces based on Periodic B3LYP calculations. Chem. Mater.</i> 20 (7), 2522-2531, 2008.	Q1
12	Pedone, A. ; Malavasi; G. Cormack, A. N.; Segre, U.; Menziani, M. C. <i>Elastic and dynamical properties of alkali silicate glasses from computer simulation techniques. Theor. Chem. Acc.</i> (2008) 120(4-6), 557-564. DOI: 10.1007/s00214-008-0434-7	Q3
13	Lusvardi, G.; Malavasi, G.; Menabue, L.; Menziani, M. C.; Pedone, A. ; Segre, U.; Aina, V.; Petardi, A.; Morterra, C.; Boccafoschi, F.; Gatti, S.; Borsetti, M.; Cannas, M. <i>Properties of zinc releasing surfaces for clinical applications. Journal of Biomaterials Applications</i> (2008), 22(6), 505-526. DOI :10.1177/088532820?079731	Q2
14	Andreoli R.; Castellini E.; Malavasi, G.; Pedone, A. <i>Deflocculant effects on surface properties of Kaolinite investigated through malachite green adsorption. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects</i> (2008), 329(1-2), 31-37. DOI:10.1016/j.colsurfa.2008.06.045	Q1
15	Pedone, A. ; Malavasi, G.; Menziani, M. C.; Segre, U.; Cormack, A. N. <i>Role of Magnesium in Soda-Lime Glasses: Insight into Structural, transport and Mechanical Properties through computer simulations. J. Phys. Chem. C</i> (2008), 112(29), 11034-11041. DOI:10.1021/jp8016776	Q1
16	Pedone, A. ; Malavasi, G.; Menziani, M. C.; Segre, U.; Cormack, A. N. <i>Molecular Dynamics studies of the stress-Strain Behaviour of Silica Glass under Tensile Load. Chem. Mater.</i> (2008) 20(13), 4356-4366. DOI:10.1021/cm800413v	Q1
17	Lusvardi, G.; Malavasi, G.; Cordata, M.; Menabue, L.; Menziani, M. C., Pedone, A. ; Segre, U. <i>Elucidation of the Structural role of Fluorine Potential Bioactive Glasses by Experimental and Computational Investigation. J. Phys. Chem. B</i> (2008) 112(40), 12730-12739. DOI:10.1021/jp803031z	Q1
18	Corno, M.; Pedone, A. ; Dovesi, R. and Ugliengo P. <i>B3LYP Simulation of the Full Vibrational Spectrum of 45S5 Bioactive Silicate Glass compared to v-Silica. Chem Mater.</i> (2008), 20(17), 5610-5621. DOI:10.1021/cm801164u	Q1
19	Pedone, A. ; Pavone, M. ; Menziani, M. C. and Barone, V. <i>Accurate First-Principle Prediction of ²⁹Si and ¹⁷O NMR Parameters in SiO₂ polymorphs: The cases of zeolites Sigma-2 and Ferrierite. J. Chem. Theo. Comp.</i> (2008), 4, 2130-2140. DOI:10.1021/ct8003035	Q1
20	Lusvardi, G.; Malavasi, G.; Tarsitano, F., Menabue, L.; Menziani, M. C., Pedone, A. <i>Quantitative Structure-Property Relationships of Potentially Bioactive Fluoro Phospho-Silicate Glasses. J Phys Chem B</i> , (2009) 113, 10331-10338. DOI:10.1021/jp809805z	Q1
21	Corno, M., Pedone, A. <i>Vibrational features of phosphor-silicate glasses: Periodic B3LYP Simulations. Chemical Physics Letters</i> , (2009), 476, 218-222. DOI:10.1016/j.cplett.2009.06.039	Q2
22	Pedone, A. ; Malavasi, G.; Menziani, M. C. <i>Computational Insight Into the Effect</i> Q1	Q1

	<i>of CaO/MgO Substitutions on the Structural Properties of Phospho-silicate Bioactive Glasses.</i> J. Phys. Chem. C , (2009), 113, 15723-15730. DOI:10.1021/jp904131t	
23	Pedone, A. <i>Properties Calculations of Silica-Based Glasses by Atomistic Simulations Techniques: A review.</i> J. Phys. Chem. C , (2009), 113, 20773-20784. DOI:10.1021/jp9071263	Q1
24	Pota, M.; Pedone, A. , Malavasi, G.; Durante, C.; Cocchi, M.; Menziani, M. C. <i>Molecular Dynamics Simulations of Sodium Silicate Glasses: Optimization and Limits of the Computational Procedure.</i> Computational Materials Science and Engineering . (2010), 47, 739-751 DOI:10.1016/j.commatsci.2009.10.017	Q1
25	Pedone, A. ; Bloino, J.; Monti, S.; Prampolini, G.; Barone, V. <i>Absorption and Emission UV-Vis Spectra of the TRITC Fluorophore molecule in solution: a quantum mechanical study.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. (2010) 12, 1000-1006, DOI:10.1039/b920255b	Q1
26	Pedone, A. ; Barone, V. <i>Unraveling Solvent Effects on the Electronic Absorption Spectra of TRITC Fluorophore in Solution: a Theoretical TD-DFT/PCM study.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 2010, 12, 2722-2729. DOI:10.1039/b923419e	Q1
27	Cimino, P.; Pedone, A. ; Stendardo, E.; Barone, V. <i>Interplay of stereo-electronic, environmental, and dynamical effects in determining the EPR parameters of aromatic spin-probes: INDCO as a test case.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 2010, 12, 3741-3746.	Q1
28	Pedone, A. ; Biczysko, M.; Barone, V. <i>Environmental Effects in Computational Chemistry: Accuracy and Interpretations.</i> ChemPhysChem (2010), 11, 1812. DOI:10.1002/cphc.200900976	Q1
29	Pedone, A. ; Charpentier, T.; Menziani, M. C. <i>Multinuclear NMR study of the CaSiO₃ Glass: Simulation from first principles.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. (2010), 2010, 12, 6054 - 6066, DOI: 10.1039/b924489a	Q1
30	Barone, V.; Bloino, J.; Monti, S.; Pedone, A. ; Prampolini, G. <i>A Theoretical Multi-level Approach for the Study of Optical Properties of Organic Dyes in Solution.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 2010, 10550-10561, DOI: 10.1039/c002722g	Q1
31	Barone, V.; Cimino, P.; Pedone, A. <i>An integrated computational protocol for the accurate prediction of EPR and PNMN parameters of nitroxide radicals in solution.</i> Magnetic Resonance in Chemistry , 2010, 48, S11-S22. DOI 10.1002/mrc.2640	Q2
32	Stendardo, E.; Pedone, A. ; Cimino, P.; Menziani, M. C.; Crescenzi, O.; Barone, V. <i>Extension of the AMBER Force-Field for the Study of Large Nitroxides in Condensed Phases: An ab initio Parameterization.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 2010, 12, 11697 - 11709	Q1
33	Pedone, A. ; Charpentier, T.; Malavasi, G.; Menziani, M. C. <i>New Insights into the Atomic Structure of 45S5 Bioglass by means of Solid-State NMR Spectroscopy and Accurate First-Principles Simulations.</i> Chem. Mater. , 2010, 22, 5644-5652 DOI: 10.1021/cm102089c	Q1
34	Barone, V.; Bloino, J.; Monti, S.; Pedone, A. ; Prampolini, G. <i>Fluorescence Spectra of Organic Dyes in Solution: A Time Dependent Multilevel Approach</i>	Q1

	Phys. Chem. Chem. Phys. , 2011, 13, 2160-2166. DOI: 10.1039/c0cp01320j.	
35	Christie, J. K.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Tilocca, A. <i>The fluorine environment in bioactive glasses: ab initio molecular dynamics simulations.</i> J. Phys. Chem. B , 2011, 115, 2038-2045, DOI:10.1021/jp110788h.	Q1
36	Ori, G.; Montorsi, M.; Pedone, A. ; Siligardi, C. <i>Insight into the Structure of Vanadium containing Glasses: a Molecular Dynamics Study.</i> J. Non-Crys. Sol. , 2011 357, 2571–2579 DOI:10.1016/j.jnoncrysol.2011.02.002.	Q1
37	Pedone, A. ; Prampolini, G.; Monti, S.; Barone, V. <i>Absorption and Emission Spectra of Fluorescent Silica Nanoparticles from TD-DFT/MM/PCM calculations.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 2011, 13, 16689–16697 DOI:10.1039/C1CP21475F.	Q1
38	Pedone, A. ; Prampolini, G.; Monti, S.; Barone, V.; <i>Realistic Modelling of fluorescent Dye-Doped silica nanoparticles: A Step Toward the Understanding of their Enhanced Photophysical Properties.</i> Chem. Mater. 2011, 23, 5013-5023.	Q1
39	Pedone, A. ; Gambuzzi, E.; Malavasi, G.; Menziani M. C. <i>First-Principles Simulations of the ²⁷Al and ¹⁷O Solid State NMR spectra of the CaAl₂Si₃O₁₀ glass.</i> Theor Chem Acc 2012, 131, 1147, DOI: 10.1007/s00214-012-1147-5	Q3
40	Biczysko, M.; Bloino, J.; Brancato, G.; Cacelli, I.; Cappelli, C.; Ferretti, A.; Lami, A.; Monti, S.; Pedone, A. ; Prampolini, G.; Puzzarini, C.; Santoro, F.; Trani, F.; Villani, G. <i>Integrated computational approaches for spectroscopic studies of molecular systems in the gas phase and in solution: pyrimidine as a test case.</i> Theor Chem Acc 2012, 131,1201, DOI: 10.1007/s00214-012-1201-3	Q3
41	Pedone, A. ; Charpentier, R.; Menziani, M. C. <i>The structure of fluorine containing Bioactive Glasses: new insights from First-Principles Calculations and Solid State NMR Spectroscopy.</i> J. Mater. Chem. 2012, 22, 12599-12608 DOI: 10.1039/C2JM30890H.	Q1
42	Pedone, A. ; Presti, D.; Menziani, M. C. <i>On the ability of Periodic Dispersion-Corrected DFT Calculations to Predict Molecular Crystal Polymorphism in para-diiodobenzene.</i> Chem. Phys. Lett. 2012, 541, 12-15.	Q2
43	Pedone, A. ; Gambuzzi, E.; Menziani M. C. <i>Unambiguous description of the oxygen environment in multicomponent aluminosilicate glasses from ¹⁷O Solid State NMR computational spectroscopy.</i> J. Phys. Chem. C. 2012, 116, 14599-14609	Q1
44	Salvadori, E.; Di Valentin, M.; Kay, C. M. W.; Pedone, A. ; Barone V.; Carbonera D. <i>The Electronic Structure of the Lutein Triplet State in Plant Light-Harvesting Complex II.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 2012, 14, 12238–12251	Q1
45	Pedone, A. ; Bloino, J.; Barone, V. <i>Role of Host-Guest Interactions in Tuning the Optical Properties of Coumarin Derivatives Incorporated in MCM-41: A TD-DFT Investigation.</i> J. Phys. Chem. C , 2012, 116, 17807–17818	Q1
46	Grubisic, S.; Brancato, G.; Pedone, A. ; Barone, V. <i>Extension of the AMBER force field to cyclic α, α dialkylated peptides.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. , 2012, 14, 15308-15320 DOI: 10.1039/C2CP42713C	Q1
47	Malavasi, G.; Pedone, A. ; Menziani, M. C. <i>The study of the structural role of gallium and aluminium in 45S5 Bioactive glasses from computer simulations.</i> J. Phys. Chem. B , 2013, 117, 4142-4150. DOI: 10.1021/jp400721	Q1

48	Berardo, E.; Pedone, A. ; Ugliengo, P.; Corno, M. <i>DFT modeling of 45S5 and 77S soda-lime phospho-silicate glass surfaces: clues on different bioactivity mechanism.</i> Langmuir , 2013, 29, 5749-5759. DOI: 10.1021/la304795w	
49	Charpentier, T.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>Computational simulations of solid state NMR spectra: a new era in structure determination of oxide glasses.</i> RSC Advances . 2013, 3 (27), 10550 – 10578 DOI: 10.1039/C3RA40627J	Q1
50	Pedone, A. ; Gambuzzi, E.; Barone, V.; Bonacchi, S.; Genovese, D.; Rampazzo, E.; Prodi, L.; Montalti, M. <i>Understanding the photophysical properties of coumarin-based Pluronic-Silica (PLUS) silica nanoparticles by means of time-resolved emission spectroscopy and accurate TDDFT/stochastic calculations.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. , 2013, 15, 12360-12372	Q1
51	Malavasi, G.; Menabue, L.; Menziani, M. C.; Pedone, A. ; Salinas, A.; Vallè-Regi, M. <i>The bioactivity of SiO₂-CaO and SiO₂-CaO-P₂O₅ glasses explained by molecular dynamic simulations.</i> J. Sol-Gel Sci. Technol. 2013, 67:208-219 DOI 10.1007/s10971-011-2453-4.	Q2
52	Pedone, A. <i>The Role of the Solvent on Charge Transfer in 7-aminocoumarin dyes: new hints from TD-CAM-B3LYP and State Specific PCM calculations.</i> J. Chem. Theo. Comp. 2013, 9, 4087-4096 DOI: 10.1021/ct4004349	Q1
53	Ferrara, C.; Tealdi, C.; Mustarelli, P.; Pedone, A. ; Menziani, M. C. <i>Local versus average structure in LaSrAl₃O₇: a NMR and DFT investigation.</i> J. Phys. Chem. C 2013, 117 (45), 23451–23458	Q1
54	Presti, D.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Civalleri, B.; Maschio, L. <i>Oxalyl Dihydrazide Polymorphism: a Periodic Dispersion-Corrected DFT and MP2 Investigation.</i> CrystEngComm . 2014, 16, 102-109. DOI: 10.1039/C3CE41758A	Q1
55	Gambuzzi, E.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Angeli, F.; Caurant, D.; Charpentier, T. <i>Probing the silicon and aluminium chemical environments in silicate and aluminosilicate glasses by solid state NMR spectroscopy and accurate first-principles calculations.</i> Geochim. Cosmochim. Ac. 2014, 125, 170-185	Q1
56	Muniz-Miranda, F.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>Assessment of Exchange-Correlation Functionals in reproducing the Structure and Optical Gap of Organic-protected Gold Nanoclusters.</i> J. Phys. Chem. C. 2014, 118, 7532-7544	Q1
57	Barone, V.; Biczysko, M.; Bloino, J.; Carta, L.; Pedone, A. <i>Environmental and dynamical effects on the optical properties of molecular systems by time-independent and time-dependent approaches: coumarin derivatives as test cases.</i> Comp. Theor. Chem. 2014, 1037, 35-48. http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2014.03.027	Q2
58	Presti, D.; Pedone, A. ; Menziani, M. C. <i>Unravelling the polymorphism of [(p-cymene)Ru(kN-INA)Cl₂] through dispersion-corrected DFT and NMR GIPAW calculations.</i> Inorg. Chem. (2014) 53(15) 7926-7935 DOI: 10.1021/ic5006743	Q1
59	Muniz-Miranda, F.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>On the Optoelectronic Properties of Phosphine and Thiolate Protected Undecagold Nanoclusters</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 2014, 16, 18749-18758, DOI: 10.1039/C4CP02506G.	Q1
60	Gambuzzi, E.; Charpentier, T.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>Computational interpretation of ²³Na 3QMAS NMR Spectra: a thorough investigation of the Na environment in silicate glasses.</i> Chem. Phys. Letters (2014) 612, 56-61, DOI:	Q2

	10.1016/j.cplett.2014.08.004.	
61	Gambuzzi, E.; Pedone, A. <i>Core-Shell Molecular Dynamics Simulations of Ce-containing Silicophosphate Glass Structures.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. (2014) 16 (39), 21645 - 21656 DOI: 10.1039/C4CP02577F	Q1
62	Delle Piane, M.; Corno, M.; Pedone, A. ; Dovesi, R.; Ugliengo, P. <i>MCM-41 mesoporous silica as drug delivery system: adsorption of ibuprofen simulated by large-scale hybrid density functional calculations.</i> J. Phys. Chem. C 2014, 118 (46), pp 26737–26749 DOI: 10.1021/jp507364h	Q1
63	Presti, D.; Labat, F.; Pedone, A. ; Ciofini, I.; Menziani, M. C.; Adamo C. <i>In silico study of thermochromic molecular crystals: a DFT QM/QM' approach for the description of solid Salicylidene Aniline.</i> J. Chem. Theor. Comput. 2014, 10 (12), pp 5577–5585 DOI: 10.1021/ct500868s	Q1
64	Tavanti, F.; Pedone, A. ; Menziani, M. C. <i>A closer look into the Ubiquitin Corona on Gold Nanoparticle by computational studies.</i> New Journal of Chemistry. 2015, 39 , 2474-2482 DOI: 10.1039/C4NJ01752H	Q1
65	Muniz-Miranda, F.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>DFT and TD-DFT Assessment on the structural and optoelectronic Properties of Organic-Ag₁₄ Nanocluster.</i> J. Phys. Chem. A 2015, 119, 5088-5098 DOI: 10.1021/jp507679f	Q2
66	Nicolini, V.; Gambuzzi, E.; Malavasi, G.; Menabue, L.; Menziani, M. C.; Lusvardi, G.; Pedone, A. ; Benedetti, F.; Luches, P.; D'Addato, S.; Valeri, S. <i>Evidence of Catalase Mimetic Activity in Ce³⁺/Ce⁴⁺ doped Bioglasses.</i> J. Phys. Chem B 2015, 119 (10), pp 4009–4019 DOI: 10.1021/jp511737b	Q1
67	Gambuzzi, E.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Angeli, F.; Florian, P.; Charpentier, T. <i>Calcium Environment in Silicate and Aluminosilicate Glasses Probed by ⁴³Ca MQMAS NMR experiments and MD-GIPAW calculations.</i> Solid State NMR 2015, 68-68, 31-36. doi:10.1016/j.ssnmr.2015.04.003	Q1
68	Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. <i>Effect of Silver Doping on the Photoluminescence of Ag_nAu_{25-n} Nanoclusters: A TDDFT Investigation.</i> J. Phys. Chem. C 2015, 119, 10766-10775. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b02655.	Q1
69	Tavanti, F.; Pedone, A. ; Menziani, M. C. <i>Competitive binding of proteins on gold nanoparticles using molecular dynamics simulations.</i> J. Phys. Chem. C 2015, 119, 22172-22180. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b05796	Q1
70	Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. ; Battistelli G.; Montalti, M.; Bloino, J.; Barone, V. <i>Benchmarking DFT functionals against vibronic spectra: 7-aminocoumarin molecules as test cases.</i> J. Chem. Theor. Comput. 2015, 11, 5371-5384. DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00750	Q1
71	Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Cormack, A. N. <i>Dynamics of Fracture in Silica and Soda-Silicate Glasses: from bulk materials to nanowires.</i> J. Phys. Chem. C 2015, 119, 25499-25507. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b08657.	Q1
72	Presti, D.; Pedone, A. ; Mancini, G.; Duce, C.; Tinè, M. R.; Barone, V. <i>Insights on structural and dynamical features of water at halloysite interfaces probed by DFT and Classical Molecular Dynamics Simulations.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. , 2016, 18 , 2164-2174 DOI: 10.1039/c5cp05920h	Q1
73	Muniz-Miranda, F.; Presti, D.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>Electronic and Optical Properties of the Au₂₂[1,8-bis(diphenylphosphino) octane]₆ nanocluster</i>	Q3

	<i>disclosed by DFT and TDDFT calculations. Theor. Chem. Acc.</i> 2016, 135, 5. DOI 10.1007/s00214-015-1764-x	
74	Presti, D.; Labat, F.; Pedone, A. ; Frisch, M. J.; Hratchian, H. P.; Ciofini, I. Menziani, M.C; Adamo C. <i>Modeling emission features of salicylidene aniline molecular crystals: A QM/QM' approach. J. Comp. Chem.</i> 2016, DOI: 10.1002/jcc.24282	Q1
75	Muniz-Miranda, M.; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. <i>Raman and DFT study of methimazole chemisorbed on gold colloidal nanoparticles. Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , 2016,18, 5974-5980 DOI: 10.1039/C5CP07597A	Q1
76	Nicolini, V.; Varini, E.; Malavasi, G.; Menabue L.; Menziani, M. C.; Lusvardi, G.; Pedone, A. ; Benedetti, F.; Luches, P. <i>The effect of composition on structural, thermal, redox and bioactive properties of Ce-containing glasses. Materials and Design</i> 97, 2016, 73-85. doi:10.1016/j.matdes.2016.02.056	Q1
77	Presti, D.; Pedone, A. ; Ciofini, I.; Labat, F.; Menziani, M. C.; Adamo, C. <i>Optical properties of the dibenzothiazolyphenol molecular crystals through ONIOM calculations: the effect of the electrostatic embedding scheme. Theor. Chem. Acc.</i> 2016, 135, 86. http://dx.doi.org/10.1007/s00214-016-1808-x	Q3
78	Pedone, A. <i>Recent advances in solid-state NMR computational spectroscopy: the case of alumino-silicate glasses. Int. J. Quant. Chem.</i> 2016 116, 1520-1531. DOI: 10.1002/qua.25134	Q2
79	Muniz-Miranda, F.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>Assessment of the Basis-Set Effect on the Structural and Electronic Properties of Organic-Protected Gold Nanoclusters. Theor. Chem. Acc.</i> 135, 2016, 94. DOI: 10.1007/s00214-016-1856-2	Q3
80	Pedone, A. ; Muniz-Miranda F.; Tilocca, A.; Menziani, M. C. <i>The antioxidant properties of Ce-containing bioactive glass nanoparticles explained by Molecular Dynamics simulations. Biomed. Glasses</i> 2016; 2:19–28. DOI 10.1515/bglass-2016-0003	Q2
81	Spepi, A.; Duce, C.; Pedone, A. ; Presti, D.; Rivera J.-G.; Ierardi V.; Tiné, M. R. <i>Experimental and DFT Characterization of Halloysite Nanotubes loaded with Salicylic Acid. J. Phys. Chem. C</i> , 2016, 120 (47), pp 26759–26769 DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06964	Q1
82	Muniz-Miranda, F.; Lodesani, F.; Presti, D.; Tavanti, F.; Malferrari, D.; Pedone, A. <i>Supercritical CO₂ Confined in Palygorskite and Sepiolite Minerals: A Classical Molecular Dynamics Investigation. J. Phys. Chem. C.</i> 2016, 120 (47), pp 26945–26954 DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b09983.	Q1
83	Alberga, D.; Ciofini, I.; Mangiatordi, G. F.; Pedone, A. ; Roncali J.; Lattanzi, G.; Adamo, C. <i>Effects of Substituents on Transport Properties of Molecular Materials for Organic Solar Cells: a Theoretical Investigation. Chem. Mater.</i> , 2017, 29 (2), pp 673–681. DOI: 10.1021/acs.chemmater.6b04277	Q1
84	Gellini, C; Deepak, F. L.; Muniz-Miranda, M; Caporali, S; Muniz-Miranda, F; Pedone, A. ; Innocenti, C.; Sangregorio, C. <i>Magnetic Nanoparticles obtained by two-step laser ablation of Nickel and Silver in pure water. J. Phys. Chem. C.</i> , 2017, 121 (6), pp 3597–3606 DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b11628	Q1
85	Presti, D.; Wilbraham, L.; Targa, C.; Labat, F.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Ciofini, I.; Adamo, C. <i>Understanding Aggregation-Induced Emission in</i>	Q1

	<i>Molecular Crystals: Insights from Theory. J. Phys. Chem. C</i> , 2017, 121 (10), pp 5747–5752 DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b00488	
86	Pedone, A. ; Palazzetti, F.; Barone, V. <i>Models of Aged Magnesium-Silicate-Hydrate Cements Based on the Lizardite and Talc Crystals: A Periodic DFT-GIPAW Investigation. J. Phys. Chem. C</i> , 2017, 121 (13), pp 7319–7330 DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b00708.	Q1
87	Presti, D.; Pedone, A. ; Licari, D.; Barone, V. <i>A modular Implementation for the simulation of 1D and 2D Solid-State NMR spectra of quadrupolar nuclei in the Virtual Multifrequency Spectrometer VMS-Draw Graphical Interface. J. Chem. Theory and Comp.</i> 2017, 13, 2215-2229. DOI:10.1021/acs.jctc.7b00154	Q1
88	Benedetti, F.; Luches, P.; D’Addato S.; Valeri, A.; Nicolini, V.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Malavasi, G. P. Structure of active cerium sites within bioactive glasses. <i>J. Amer. Ceramic Soc.</i> 2017, 100 (11), pp. 5086-5095, DOI: 10.1111/jace.15049.	Q1
89	Nicolini, V.; Gambuzzi, E.; Malavasi, G.; Menabue, L.; Menziani, M. C.; Lusvardi, G.; Pedone, A. ; Benedetti, F.; Luches, P.; D’Addato, S.; Valeri, S. Correction to ‘Evidence of Catalase Mimetic Activity in Ce ³⁺ /Ce ⁴⁺ doped Bioglasses’. <i>J. Phys. Chem B</i> 2017, 121 (27), pp 6773-6773 DOI: 10.1021/jp511737b	Q1
90	Tavanti, F.; Pedone, A. ; Matteini, P.; Menziani, M. C. <i>Computational insight into the interaction of cytochrome c with wet and PVP-coated Ag surfaces. J. Phys. Chem. B</i> , 2017, 121 (41), 9532–9540. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b07492	Q1
91	Malferrari, D.; Bernini, F.; Tavanti, F.; Tuccio, L.; Pedone, A. ; <i>Experimental and Molecular Dynamics Investigation Proves That Montmorillonite Traps the Biogenic Amines Histamine and Tyramine. J. Phys. Chem. C</i> 2017, 121, 27493-27503. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b09804.	Q1
92	Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. ; Muniz-Miranda, M. <i>Spectroscopic and DFT investigation on the Photo-Chemical Properties of a push-pull chromophore: 4-Dimethylamino-4’-Nitrostilbene. Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy</i> , 2018, 190, 33-39. DOI: 10.1016/j.saa.2017.08.072	Q1
93	Chen, X.; Pedone, A. ; Chen, X.; Apperley, D.; Hill, R.G.; Karpukhina, N. <i>The Structural Investigations of Mixed Fluoride- and Chloride-Containing Silicate Bioactive Glasses. Scientific Reports</i> 8, (2018) 1316. DOI: 10.1038/s41598-018-19544-2	Q1
94	Bolzonello, L.; Polo, A.; Volpato, A.; Meneghin, E.; Cordaro, M.; Trapani, M.; Fortino, M.; Pedone, A. ; Castriciano, M. A.; Collini, E. <i>Two-Dimensional Electronic Spectroscopy Reveals Dynamics and Mechanisms of Solvent-Driven Inertial Relaxation in Polar BODIPY Dyes. J. Phys. Chem. Lett</i> 9, (2018), 1079-1085. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.7b03393	Q1
95	Tavanti, F.; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. <i>The effect of alkaline cations on the Intercalation of Carbon Dioxide in Sepiolite Minerals: a Molecular Dynamics Investigation. Frontiers in Materials</i> (2018) 5:12 doi: 10.3389/fmats.2018.00012	Q2
96	Pedone, A. ; Chen, X.; Hill, R. G.; Karpurkina, N. <i>Molecular Dynamics Investigation of Halogen-Containing Silicate Bioactive Glasses. J. Phys. Chem. B.</i> (2018) 122 (11), pp 2940–2948. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b00547	Q1

97	Pedone, A. ; Tavanti, F.; Malavasi, G.; Menziani, M. C. <i>An atomic-level look into the bioactive properties of Cerium-doped glasses.</i> J. Non-Cryst. Solids (2018) https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.03.040	Q1
98	Tavanti, F.; Pedone, A. ; Menziani, M.C.; <i>Computational Insight into the Effect of Natural Compounds on the Destabilization of Preformed Amyloid-β(1–40) Fibrils</i> Molecules (2018) 23(6), 1320; https://doi.org/10.3390	Q2
99	Muniz-Miranda, M.; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. ; Calisi, N.; Caporali, S. <i>SERS, XPS and DFT investigation on palladium surfaces coated with 2,2'-bipyridine monolayers.</i> Appl. Surf. Science (2018) 457, 98-103. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.06.232	Q1
100	Fortino, M.; Bloino, J., Collini, E.; Bolzonello, L.; Trapani, M.; Faglioni, F.; Pedone, A. <i>On the Simulation of Vibrationally Resolved Electronic Spectra of medium-size molecules: the case of Styryl Substituted Bodipys.</i> Phys. Chem. Chem. Phys. 21 (2019), 3512-3526 DOI: 10.1039/C8CP02845A	Q1
101	Muniz-Miranda, M.; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. <i>SERS and DFT investigation on push-pull molecules: 4-Dimethylamino-4'-nitrostilbene adsorbed on silver colloidal nanoparticles.</i> ChemistrySelect (2018), 3, 8698-8702. https://doi.org/10.1002/slct.201801825	Q2
102	Brugnoli, L.; Ferrari, A. M.; Civalleri, B.; Pedone, A. ; Menziani, M. C. <i>Assessment of density functional approximations for highly correlated oxides: the case of CeO₂ and Ce₂O₃.</i> J. Chem. Theor. Comp. (2018) DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00600	Q1
103	Gellini, C.; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A.; Muniz-Miranda, M. <i>SERS active Ag–SiO₂ nanoparticles obtained by laser ablation of silver in colloidal silica</i> Beilstein J. Nanotechnol. 2018, 9, 2396–2404. doi:10.3762/bjnano.9.224	Q1
104	Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. ; Muniz-Miranda, M.; <i>Raman and Computational Study on the Adsorption of Xanthine on Silver Nanocolloids.</i> ACS Omega 3 (2018), 13530-13537.	
105	Gasperi, G.; Brugnoli, L.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Valeri, S.; Luches, P. <i>Reducibility of Ag- and Cu- modified Ultrathin Epitaxial Cerium Oxide Films.</i> J. Phys. Chem. C 123 (2019), 22. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b02378	Q1
106	Fortino, M.; Berselli, A.; Stone-Weiss, N.; Deng, L.; Goel, A.; Du, J.; Pedone, A. <i>Assessment of interatomic parameters for the reproduction of borosilicate glass structures via DFT-GIPAW calculations.</i> J. Am. Cer. Soc. 102 (2019) 7225-7243 https://doi.org/10.1111/jace.16655	Q1
107	Caporali, S.; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. ; Muniz-Miranda, M. <i>SERS, XPS and DFT Study of Xanthine Adsorbed on Citrate-Stabilized Gold Nanoparticles.</i> Sensors 19 (2019) 2700. https://doi.org/10.3390/s19122700	Q1
108	Tavanti, F.; Pedone, A. ; Menziani, M.C. <i>Multiscale Molecular Dynamics Simulations of Multiple Protein Adsorption on Gold Nanoparticles.</i> Int. J. Mol. Sci. 20 (2019) 3539. https://doi.org/10.3390/ijms20143539	Q1
109	Gualtieri, A.; Lusvardi, G, Pedone, A. et al. <i>Structure Model and Toxicity of the Product of Biodissolution of Chrysotile Asbestos in the Lungs.</i> Chem. Res. Toxicol. 32 (2019), 10 https://doi.org/10.1021/acs.chemrestox.9b00220	Q2
110	Brugnoli, L.; Pedone, A. ; Menziani, M. C.; Adamo, C.; Labat, F. <i>H₂ Dissociation</i>	Q1

	and Water Evolution on Silver-Decorated CeO ₂ (111): A Hybrid Density Functional Theory Investigation. J. Phys. Chem. C 123 (2019) 42. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b06805	
111	Zoppi, A.; Caporali, S.; Muniz-Miranda, F.; Pedone, A. Muniz-Miranda, M. Adsorption of Trans-Zeatin on Laser-Ablated Gold Nanoparticles for Transport into Plant Cells and Growth Stimulation. ACS Appl. Nano Mater. 2 (2019), 7319-7327 https://doi.org/10.1021/acsanm.9b01801	Q2
112	Lodesani, F.; Menziani, M.C.; Hijiaya, H.; Takato, Y.; Urata, S.; Pedone, A. <i>Structural Origins of the Mixed Alkali Effect in Alkali Aluminosilicate Glasses: Molecular Dynamics Study and its Assessment.</i> Scientific Reports 10 (2020), 1-18. https://doi.org/10.1038/s41598-020-59875-7	Q1
113	Lodesani, F.; Menziani, M.C.; Maeda, K; Takato, Y; Urata, S.; Pedone, A. <i>Disclosing crystal nucleation mechanism in lithium disilicate glass through molecular dynamics simulations and free-energy calculations.</i> Scientific reports 10 (1) 2020, 1-14. https://doi.org/10.1038/s41598-020-74764-9	Q1
114	F Tavanti, A Pedone , MC Menziani, A Alexander-Katz <i>Computational insights into the binding of monolayer-capped gold nanoparticles onto Amyloid-β fibrils</i> ACS Chemical Neuroscience (2020) 11 (19), 3153-3160. https://doi.org/10.1021/acchemneuro.0c00497	Q1
115	Nicholas Stone-Weiss, Henrik Bradtmüller, Mariagrazia Fortino, Marco Bertani, Randall E Youngman, Alfonso Pedone , Hellmut Eckert, Ashutosh Goel <i>Combined Experimental and Computational Approach toward the Structural Design of Borosilicate-Based Bioactive Glasses</i> J Phys Chem C 124 (2020), 17655-1767. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c04470	Q1
116	Francesco Tavanti, Alfonso Pedone , Maria Cristina Menziani <i>Insights into the Effect of Curcumin and (–)-Epigallocatechin-3-Gallate on the Aggregation of Aβ (1–40) Monomers by Means of Molecular Dynamics</i> Int. J. Mol. Sci. 21 (2020), 5462. https://doi.org/10.3390/ijms21155462	Q1
117	M Fortino, E Collini, A Pedone , J Bloino <i>Role of specific solute–solvent interactions on the photophysical properties of distyryl substituted BODIPY derivatives</i> Physical Chemistry Chemical Physics 22 (2020), 10981-10994. DOI: 10.1039/D0CP00034E	Q1
118	Brugnoli, L.; Pedone, A.; Menziani, M. C.; Adamo, C.; Labat, F. <i>O₂ Activation over Ag- Decorated CeO₂ (111) and TiO₂ (110) Surfaces: A Theoretical Comparative Investigation.</i> J. Phys. Chem. C (2020), 124, 47, 25917–25930 https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c09080	Q1
119	Tavanti, F.; Pedone, A. ; Menziani, M.C. <i>Disclosing the Interaction of Gold Nanoparticles with Aβ(1-40) Monomers through Replica Exchange Molecular Dynamics Simulations.</i> Int. J. Mol. Sci. 22 (2021) 1-12. DOI: 10.3390/ijms22010026	Q1
120	Fortino. M.; Collini, E.; Bloino, J.; Pedone, A. <i>Unraveling the internal conversion process within the Q-bands of a chlorophyll-like-system through surface-hopping molecular dynamics simulations.</i> J. Chem. Phys. 154 (2021) 0039949. DOI: 10.1063/5.0039949	Q1
121	Bertani, M.; Menziani, M. C.; Pedone, A. <i>Improved Empirical Interatomic Potential Model for Multicomponent Oxide Glasses and Crystals.</i> Phys. Rev.	Q1

	Mater. (2021) 5(4), 045602	
122	Pedone, A.; Cannillo, V. Menziani, M. C. <i>Toward the Understanding of Crystallization, Mechanical Properties and Reactivity of Multicomponent Bioactive Glasses Through Molecular Dynamics Simulations.</i> Acta Materialia (2021), 213, 116977 https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116977	Q1
123	Brugnoli, L.; Menziani, M. C.; Urata, S.; Pedone, A. <i>Development and Applications of a ReaxFF Reactive Force Fields for Cerium Oxide/Water Interfaces</i> J. Phys. Chem. A 2021, 125, 25, 5693–5708. https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c04078	Q2
124	Lodesani, F.; Tavanti, F.; Menziani, M. C.; Maeda, K.; Takato Y.; Urata, S.; Pedone, A. Exploring the Crystallization Path of Lithium Disilicate through Metadynamics Simulations. Phys. Rev. Mat. 5, 075602 (2021). DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.5.075602	Q1
125	Brugnoli, L.; Shingo, U.; Pedone, A. <i>First-Principles study of the H₂O₂ adsorption and dissociation on different CeO₂ (111) Surface Models.</i> J. Phys.: Cond. Matter (2022) 34, 164006. DOI: 10.1088/1361-648X/ac5278/meta	Q2
126	Malavasi, G.; Pedone, A. <i>The Effect of the Incorporation of Catalase Mimetic Activity Cations on the Structural, Thermal and Chemical Durability Properties of the 45S5 Bioglass®.</i> Acta Materialia (2022) 229, 117801. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117801	Q1
127	Arthur Desvals, Mariagrazia Fortino, Corentin Lefebvre, Johann Rogier, Clément Michelin, Samy Alioui, Elodie Rousset, Alfonso Pedone , Gilles Lemerrier, Norbert Hoffmann <i>Synthesis and characterization of polymethine dyes carrying thiobarbituric and carboxylic acid moieties.</i> New Journal of Chemistry (2022) 46, 8971. DOI: 10.1039/D2NJ00684G	Q1
128	Lodesani, F.; Menziani, M. C.; Urata, S.; Pedone, A. Biasing Crystallization in fused silica: An assessment of optimal metadynamics parameters. J. Chem. Phys. (2022) 156, 194501. https://doi.org/10.1063/5.0089183	Q1
129	Bertani, M; Pallini, A.; Cocchi, M.; Menziani, M.C.; Pedone, A. <i>A new self-consistent empirical potential model for multicomponent borate and borosilicate glasses.</i> J. Am. Cer. Soc. (2022) https://doi.org/10.1111/jace.18681	Q1
130	Pedone, A.; Bertani, M.; Brugnoli, L.; Pallini, A. <i>Interatomic Potentials for oxide glasses: Past, present, and future.</i> J. Non-Cryst. Solids: X (2022) 15 100115. https://doi.org/10.1016/j.nocx.2022.100115	Q1
131	Muniz-Miranda, F.; Pedone, A.; Menziani, M.C.; Muniz-Miranda, M. <i>DFT and TD-DFT Study of the Chemical Effect in the SERS Spectra of Piperidine Adsorbed on Silver Colloidal Nanoparticles.</i> Nanomaterials 2022, 12(17), 2907; https://doi.org/10.3390/nano12172907	Q1
132	Muniz-Miranda, M.; Muniz-Miranda, F.; Menziani, M. C.; Pedone, A. Can DFT Calculations Provide Useful Information for SERS Applications? <i>Molecules</i> 2023, 28, 573. https://doi.org/10.3390/molecules28020573	Q2

133	Lodesani, F.; Menziani, M. C.; Urata, S.; Pedone, A. <i>Evidence of Multiple Crystallization Pathways in Lithium Disilicate: A Metadynamic Investigation</i> . J. Phys. Chem. Letters 2023, 14, 1411-1417. https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.2c03563	Q1
134	Brugnoli, L.; Miyatani, K.; Akaji, M.; Urata, S.; Pedone, A. <i>New Atomistic Insights on the Chemical Mechanical Polishing of Silica Glass with Ceria Nanoparticles</i> . Langmuir 2023, 39, 5527-5541. https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c00304	Q1
135	Bertani, M; Pallini, A.; Lodesani, F.; Cocchi, M.; Menziani, M.C.; Pedone, A. Erratum for <i>A new self-consistent empirical potential model for multicomponent borate and borosilicate glasses</i> . J. Amer. Cer. Soc. (2023) https://doi.org/10.1111/jace.19158	Q1
136	Bertani, M.; Bisbrouck, N.; Delaye, J.-M.; Angeli, F.; Pedone, A.; Charpentier, T. <i>Effects of magnesium on the structure of aluminoborosilicate glasses: NMR assessment of interatomic potentials models for molecular dynamics</i> . J. Amer. Cer. Soc. (2023) https://doi.org/10.1111/jace.19157	Q1

BOOK CHAPTERS AND MANUSCRIPTS IN JOURNALS WITHOUT IF.

- Lusvardi, G.; Malavasi, G.; **Pedone, A.**; Menziani, M. C.; Menabue, L.; Bolis, V.; Borsetti, M.; Boccafoschi, F.; Cannas, M. *Cell Configuration for focal adhesions in cells seeded onto zinc-doped silicate-Bioglasses*. In *Ceramic, Cells and Tissues, "Materials for Scaffolding of Biologically engineered systems-Interface and Interactions on a Nanoscale"* pp. 166-170. Faenza, May 23-27 2006. Ed. by A. Ravaglioli, A. Krajewski, CNR (ITALY). ISBN: 88-8080-071-x
- Pedone, A.**; Corno, M. *Computer Simulations Techniques for Modelling Biomaterials*. Critical Review per la **Chimica e L'Industria**, 2010, 146-155.
- Pedone A.**; Crescenzi, O. *Magnetic Resonance Spectroscopy: Singlet and Doublet Electronic States*. in 'New Strategies for Computational Spectroscopy: from small molecules to Nano Systems' Edited by Vincenzo Barone, Wiley & sons. New York (2011), ISBN: 978-0-470-47017-6
- Marta Corno, Fabio Chiatti, **Alfonso Pedone** and Piero Ugliengo (2011). In *Silico Study of Hydroxyapatite and Bioglass®: How Computational Science Sheds Light on Biomaterials*, *Biomaterials - Physics and Chemistry*, Rosario Pignatello (Ed.), ISBN: 978-953-307-418-4, InTech, Available from: <http://www.intechopen.com/articles/show/title/in-silico-study-of-hydroxyapatite-and-bioglass-how-computational-science-sheds-light-on-biomaterials>.
- Presti, D.; **Pedone, A.**; Menziani, M. C. Computational prediction of molecular crystal polymorphism in *p*-diiodobenzene: on the ability of dispersion-corrected DFT calculations **La Chimica e L'Industria**, Maggio 2013, 114-115
- Muniz-Miranda F.; **Pedone, A.**; Menziani, M. C. DFT on a Gold Nanocluster **La Chimica e L'Industria**, Gennaio 2014, 37-38.
- Gambuzzi, E.; **Pedone, A.** Experimental and Computational Achievements on the Immobilization of High-Level Nuclear Waste. **La Chimica e L'Industria**, Luglio/Agosto 2014, 51-52.
- Pedone, A.**; Winter Modeling: Workshop di Chimica Teorica e Computazionale. Resoconto pubblicato su **La Chimica e L'Industria**, Luglio/Agosto 2014, 8-9.
- Pedone, A.**; Menziani, M. C. (2015) Computational Modeling of Silicate Glasses: A Quantitative Structure-Property Relationship Perspective. In *Molecular Dynamics Simulations of Disordered Materials*. Edited by Springer International Publishing Switzerland. Editor: C. Massobrio. DOI 10.1007/978-3-319-15675-0_5

10. **Pedone, A.**; Menziani, M. C. (2016) What can we learn from atomistic simulations of bioactive glasses? In *Bioglasses: from bone regeneration to cancer treatment*. Edited by Springer International Publishing.
11. M. Muniz-Miranda; f. Muniz-Miranda and **Pedone, A.** Spectroscopic and computational studies on Ligand-Capped Metal Nanoparticles and Clusters. In *Metal Nanoparticles and Clusters*. Editor: Springer, Cham. pp. 55-87, 2018
12. Presti, D.; Muniz-Miranda, F.; Tavanti, F. and **Pedone, A.** Structure Analysis and Properties Calculations. In *Computer Simulations of Glasses: Methodologies and Applications*. Editors Jincheng Du and Alastair N. Cormack, Wiley (2022)