

CURRICULUM VITAE

Informazioni Personali

Nome: Leonardo Pacifici

Data di nascita: 1 / 1975

Indirizzo:

email:

Formazione e titoli

10/2000-10/2003

Dottorato in Scienze chimiche (XVI ciclo) conseguito presso L'Università degli studi di Perugia sotto la supervisione del Prof. Antonio Laganà. Titolo della Tesi: "Grid based molecular simulators: the nitrogen atom reactions".

11/1999

Superamento dell'Esame di Stato per l'abilitazione alla professione di Chimico

09/1994-07/1999

Laurea in Chimica conseguita presso L'Università degli studi di Perugia con votazione di 110/110 e lode. Titolo della Tesi: "Studio delle reazioni tra azoto atomico ed idrocarburi semplici mediante la tecnica dei fasci molecolari incrociati: il caso $N(^2D) + CH_4$ ".

1999

Maturità scientifica presso il Liceo Scientifico "Gandhi", Narni Scalo (TR)

Esperienze Accademiche

09/2010-10/2017

Post-Doc presso il Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Perugia.

06/2009-08/2010

Post-Doc finanziato dalla "Regione dell'Umbria" presso il Dipartimento di Chimica (progetto POR-FSE)

12/2003-11/2008

Post-Doc presso il Dipartimento di Matematica e Informatica, Università degli studi di Perugia. Titolo del progetto: "Grid applications for molecular virtual reality".

02-12/2000

Contrattista presso il Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Perugia.

Esperienze Lavorative

CURRICULUM VITAE

10/2017 - Presente: docente scuola secondaria superiore classe di concorso A-034 (Chimica e tecnologie chimiche)

2009-Presente

Consulente esterno presso SEA srl (Servizi Ecologia e Ambiente, www.seaecology.it) di Narni (TR) per implementazione Sistema Gestione Qualità ed attività analitiche.

Il sottoscritto cura dal 2009 il Sistema Gestione Qualità (SGQ) secondo le norme UNI CEI EN ISO/IEC 17025:2018 e UNI EN ISO 9001:2015 presso SEA srl. Durante il periodo ha curato e cura l'implementazione del Manuale Qualità secondo le norme citate e ha curato l'ottenimento dell'Accreditamento del laboratorio SEA presso ACCREDIA, relativamente a diverse attività di prova chimiche e microbiologiche.

Ha curato inoltre la redazione delle Procedure Gestionali e Operative necessarie all'implementazione del SGQ, con particolare riferimento alle Procedure di calcolo dell'incertezza di misura (secondo norme UNI CEI ENV 13005:2000 e QUAM:2019.1). Nello stesso periodo, il sottoscritto ha ricoperto e ricopre il ruolo di Chimico consulente esterno presso la medesima Azienda relativamente all'interpretazione e pareri sui Rapporti di Prova.

Attività Didattica

A.A. 2015/16: Docente del corso "Metodi teorici e computazionali per le scienze Molecolari" presso il Corso di Laurea (CdL) in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2011/12: Docente del corso "Modellistica Molecolare" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2010/11: Docente del corso "Scienze Atomiche e Modellistica Molecolare" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2009/10: Docente del secondo modulo (24 ore) del corso "Modellistica Molecolare" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2008/09: Docente del secondo modulo (24 ore) del corso "Elementi di scienze atomiche e molecolari" (Chimica Generale) presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2008/09: Docente del secondo modulo (24 ore) del corso "Applicazioni e calcolo in rete-Corso Avanzato" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2007/08: Docente del secondo modulo (24 ore) del corso "Applicazioni e calcolo in rete Corso Avanzato" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2007/08: Docente del secondo modulo (24 ore) del corso "Elementi di scienze atomiche e molecolari" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2006: Docente del modulo "Parallel programming models and paradigms" per il corso intensivo del Master Europeo "Theoretical Chemistry and Computational Modeling"

CURRICULUM VITAE

A.A. 2006/07: Docente del terzo modulo (16 ore) del corso "Applicazioni e calcolo in rete" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2005/06: Docente del secondo e terzo modulo (32 ore) del corso "Applicazioni e calcolo in rete II" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2004/05: Docente del secondo modulo (24 ore) del corso "Laboratorio di linguaggi di realtà virtuale" presso il CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia

Supervisore delle seguenti tesi di Laurea

A.A. 2014/15: Matteo Bazzurri, "From benchmark to real astrochemical reaction quantum using a coordinated distributed computational frame" CdL in Chimica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2014/15: Francesco Talotta, "Ab initio treatment of the CH₃OH + O reaction for combustion simulations", EM-TCCM, CdL in Chimica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2012/13: Lalita S. Uribe O., "Ab initio calculations of structure and properties of magnetic system", EM-TCCM, CdL in Chimica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2011/12: Hanif Muhammad Khan, "Theoretical investigations on potential biological and photovoltaics applications of carbon nanotubes", EM-TCCM, CdL in Chimica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2008/09: "Implementazione di codici di scattering quantistico su GPU: le nuove frontiere dell'HPC", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2008/09: A. Manfucci, "La gestione di campagne di calcolo computazionali in ambiente Grid mediante un framework collaborativo orientato ai Web Services", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2008/09: D. Ciambelli, "L'ottimizzazione delle risorse della Grid di EGEE mediante un framework intelligente basato su SOA", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2008/09: M. Verdicchio, "Atmospheric reentry calculations and extension of the formats of Quantum Chemistry data to Quantum Dynamics" (Calcoli per il rientro in atmosfera ed estensione dei formati dei dati di Chimica Quantistica alla Dinamica Quantistica), EM-TCCM, CdL in Chimica, Università degli studi di Perugia

A.A. 2006/07: A. Manfucci, "Grid Credit System: algoritmi per l'assegnazione dei crediti", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2006/07: D. Ciambelli, "Grid Credit System: un portale per la sostenibilità di COMPCHEM", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

CURRICULUM VITAE

A.A. 2006/07: M. Verdicchio, "Dinamica molecolare ab initio: reazioni dell'atomo di azoto", CdL in Chimica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2006/07: V. Capece, "Dinamica molecolare su Griglia: strutturazione del codice NAMD", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2005/06: J. Masci, "Implementazione parallela e distribuita per algoritmi di risoluzione di equazioni differenziali agli autostati", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

A.A. 2005/06: P. Cintia, "Implementazione parallela e distribuita per algoritmi di risoluzione di equazioni differenziali di propagazione", CdL in Informatica, Università degli studi di Perugia.

Scuole Frequentate

Ottobre 2007: Terza Scuola Specialistica di Calcolo Parallelo (The Third Advanced School on Parallel Computing), 08/10-12/10/2007 CINECA, Bologna (Italy)

Luglio 2007: Nona Scuola Estiva di Calcolo Parallelo (The Ninth Summer School on Parallel Computing), 10/07-21/07/2000 CINECA, Bologna (Italy).

Altre esperienze

Dicembre 2015: Short Term Scientific Mission (STSM) presso il Dipartimento di Chimica Fisica dell' Università dei Paesi Baschi (Spagna)

Giugno 2010: Short Term Scientific Mission (STSM) presso il Dipartimento di Chimica Fisica dell' Università dei Paesi Baschi (Spagna)

Maggio, 2009: Short Term Scientific Mission (STSM) presso il Dipartimento di Chimica Fisica dell' Università dei Paesi Baschi (Spagna)

Sett.-Dic./2004: Transnational Access of HPC Europe, Grant N. RII3-CT-2003-506079, at the CESCA-CEPBA, presso "Centre de Supercomputacio de Catalunya", Barcellona (Spagna)

Luglio 2004: Short Term Scientific Mission (STSM) presso il Dipartimento di Chimica Fisica dell' Università dei Paesi Baschi (Spagna)

Comunicazioni

• 1st General Meeting & SECs for Power, Industry and Engines Workshop, Certh Conference Center, Thessaloniki, Greece, August 2015, L. Pacifici, F. Talotta, N. Balucani and A. Laganà: A QUANTUM DYNAMICS SIMULATION OF THE O(3P) + CH₃OH REACTION

CURRICULUM VITAE

- ICCS 2013 Barcelona, Spain June 5 - June 7, 2013 Pacifici L., Laganà A: Time dependent quantum reactive scattering on Graphic Processing Units.
- Primo Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Pisa, 22-23 febbraio 2012 Pacifici L., Laganà A: QUANTUM REACTIVE SCATTERING CALCULATIONS ON GRAPHIC PROCESSING UNITS
- EGI User Forum, 2011: Grid empowered molecular simulators of crossed beam signals A. Laganà, L. Pacifici, S. Rampino
- Convegno Interregionale TUMA 2007 della Società Chimica Italiana, Assisi (Italy) 26-28 Settembre 2007. Integrating PUFA measurements and statistical analysis, A. Laganà, N. Faginas-Lago, L. Pacifici, A. Riganelli, F. Balestrieri, A. Costantini, F. Pierri, M. Ray, F. Scavizzi, A. Giancarloni, M. Pinsaglia.
- Convegno Interregionale TUMA 2007 della Società Chimica Italiana, Assisi (Italy) 26-28 Settembre 2007. A new distribution model for the molecular dynamics simulation of liquid propane on the EGEE-GRID parallel platform, A. Costantini, A. Laganà, L. Pacifici, O. Gervasi.
- Convegno Interregionale TUMA 2007 della Società Chimica Italiana, Assisi (Italy) 26-28 Settembre 2007. Air quality modelling in Umbria, A. Laganà, S. Crocchianti, N. Faginas-Lago, L. Pacifici, A. Costantini, G. Marchetti, M. Angelucci, M. Vecchiocattivi.
- VI Convegno nazionale del gruppo interdivisionale di Chimica Computazionale della Società Chimica Italiana (GICC2006), Isola di San Servolo, Venezia (Italy), Dicembre 2006. Fitting: A web portal for constructing potential energy surfaces, L. Pacifici, L. Arteconi, A. Laganà.
- IBER 2005 Conference, March 21-23, 2005 Lisboa, Portugal. The K^+ -(benzene)₂ cluster solvated by Ar atoms, A. Aguilar, M. Alberti', A. Laganà, L. Pacifici.
- SCI - DCF, 34mo Congresso Nazionale 20-24 Giugno 2005 Siena (Italy). A MD study of (benzene)₂-alkaline ion heteroclusters solvated by rare-gas atoms, L. Pacifici, A. Aguilar, M. Alberti', A. Laganà.
- XXXIII Congresso nazionale della Società Chimica Italiana, Napoli 21-25 Giugno 2004. A quantum study of the nitrogen atom nitrogen molecule reaction, L. Pacifici, D. Skouteris, A. Laganà.
- International Conference on Parallel Computing 2001 (ParCo2001), September 4-7, 2001, Naples, Italy. Parallel skeletons and computational grain in quantum reactive scattering calculations, S. Crocchianti, A. Laganà, L. Pacifici, V. Piermarini, in: proceedings of the International Conference ParCo2001, pp 91-100, ISBN 1-86094- 315-2, Imperial College Press (2002).
- TAM (TRACS - ACCESS - MINOS) User Group Meeting 2001 24-26 March 2001, Edinburgh, UK. Parallel methods in time dependent approaches to reactive scattering

CURRICULUM VITAE

calculations, L. Pacifici, V. Piermarini, S. Crocchianti and A. Laganà.

• VI Quantum Reactive Scattering Workshop 10-13 January 2001, California Institute of Technology, Division of Chemistry and Chemical Engineering, Pasadena, USA. A case study to develop novel computational technologies for reactive scattering, A. Laganà, S. Crocchianti, V. Piermarini, L. Pacifici.

• MOLEC 2000 Conference, September 17-22, 2000, Jerusalem, Israel. Comparison of exact and J-shifting contribution to the cross sections of the Li+FH reaction, A. Laganà, S. Crocchianti, L. Pacifici.

• Atmospheric diagnostic in urban regions workshop (in combination with 4th italian-german workshop on tropospheric chemistry), June 2-4, 2000 Convent St. Marientahl, D-02899 Ostritz. Dynamical studies of some few atom reactions, A. Laganà, A. Riganelli, S. Crocchianti, V. Piermarini, L. Pacifici, G. Zucchetta.

Publicazioni

1. Martí, C., Laganà, A., Pacifici, L., Pirani, F., Coletti, C., A quantum-classical study of the effect of the long range tail of the potential on reactive and inelastic OH + H₂ dynamics, *Chemical Physics Letters*, 769, 138404 (2021)

2. Rosi, M., Pacifici, L., Skouteris, D., ...Falcinelli, S., Balucani, N., A computational study on the insertion of N(²D) into a C—H or C—C Bond: The Reactions of N(2D) with Benzene and Toluene and Their Implications on the Chemistry of Titan, *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 12251 LNCS, pp. 744–755 (2020)

3. Balucani, N., Pacifici, L., Skouteris, D., ...Falcinelli, S., Rosi, M., A Computational Study of the Reaction N(²D)+C₆H₆ Leading to Pyridine and Phenylnitrene, *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 11621 LNCS, pp. 316–324 (2019)

4. Rosi M.,Skouteris D.,Balucani N.,Nappi C.,Lago N.F.,Pacifici L.,Falcinelli S.,Stranges D., An experimental and theoretical investigation of 1-butanol pyrolysis, *Frontiers in Chemistry*, 7(MAY), 326 (2019)

5. Balucani, N., Pacifici, L., Skouteris, D., ...Casavecchia, P., Rosi, M., A theoretical investigation of the reaction N(²D)+C₆H₆ and Implications for the upper atmosphere of Titan, *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 10961 LNCS, pp. 763–772 (2018)

6. S. Rampino, M. Pastore, E. Garcia, L. Pacifici, A. Laganà, On the temperature dependence of the rate coefficient of formation of C⁺² from C + CH⁺, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 460 (3), 2368-2375 (2016)

7. L. Pacifici, F. Talotta, N. Balucani, N. Faginas-Lago, A. Laganà, Modeling Combustions: The ab initio Treatment of the O (³P)+ CH₃OH Reaction LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE, Vol 9786, 71-83 (2016)

8. L. Pacifici, M. Pastore, E. Garcia, A. Laganà, S. Rampino, A Dynamics Investigation of the C + CH⁺ → C⁺² + H Reaction on an ab Initio Bond-Order-Like Potential, *The Journal of Physical Chemistry A*, 120 (27), pp 51255135 (2016)

CURRICULUM VITAE

9. C. Marti', L. Pacifici, A. Capriccioli, A. Laganà, Simulation of Methane Production from Carbon Dioxide on a Collaborative Research Infrastructure LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE, Vol 9786, 319-333 (2016)
10. L. Pacifici, N. Faginas-Lago, A. Lombardi, N. Balucani, D. Stranges, St. Falcinelli, M. Rosi, A Theoretical Investigation of 1-Butanol Unimolecular Decomposition, LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE, vol. 9156, 384-393 (2015)
11. A Lombardi, N Faginas-Lago, L Pacifici, G Grossi, Energy transfer upon collision of selectively excited CO₂ molecules: State-to-state cross sections and probabilities for modeling of atmospheres and gaseous flows, J. Chem. Phys., 143, 034307 (2015)
12. Noelia Faginas-Lago, Margarita Alberti', Antonio Laganà, Andrea Lombardi, Leonardo Pacifici, Alessandro Costantini, The molecular stirrer catalytic effect in methane ice formation, LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE, vol. 8579, p. 585-600 (2014)
13. Noelia Faginas-Lago, Margarita Alberti', Alessandro Costantini, Antonio Laganà, Andrea Lombardi, Leonardo Pacifici, An innovative synergistic grid approach to the computational study of protein aggregation mechanisms, JOURNAL OF MOLECULAR MODELLING, 20:2226 (2014) DOI 10.1007/s00894-014-2226-4
14. Noelia Faginas-Lago, Andrea Lombardi, Leonardo Pacifici, Alessandro Costantini, Design and implementation of a Grid application for direct calculations of reactive rates, COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY, vol. 1022, p. 103107 (2013) DOI: 10.1016/j.comptc.2013.08.014
15. Leonardo Pacifici, Marco Verdicchio, Noelia Faginas Lago, Andrea Lombardi, Alessandro Costantini, A High-Level Ab Initio Study of the N₂ + N₂ Reaction Channel, JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, vol. 34, p. 2668-2676, (2013) ISSN: 0192-8651, doi: 10.1002/jcc.23415
16. Andrea Lombardi, Noelia Faginas Lago, Leonardo Pacifici, Alessandro Costantini, Modeling of Energy Transfer From Vibrationally Excited CO₂ Molecules: Cross Sections and Probabilities for Kinetic Modeling of Atmospheres, Flows and Plasmas, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY, (2013). ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp408522m
17. Leonardo Pacifici, Marco Verdicchio, Antonio Laganà, Multi Reference versus Coupled Cluster ab Initio Calculations for the N₂ + N₂ Reaction Channels, LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE, vol. 7961, p. 31-46 (2013)
18. L. Pacifici, D. Nalli, A. Laganà, Quantum reactive scattering on innovative computing platforms, Computer Physics Communications 184(5): 1372-1380 (2013)
19. L. Pacifici, D. Nalli, Antonio Laganà, Quantum Reactive Scattering Calculations on GPU, Lecture Note in Comp. Science, 7333, 292-303 (2012)

CURRICULUM VITAE

20. M. Verdicchio, L. Pacifici, A. Laganà, Grid Enabled High Level ab initio Electronic Structure Calculations for the N_2+N_2 Exchange Reaction, Lecture Note in Comp. Science, 7333, 371-386 (2012)
21. L. Pacifici, D. Nalli and A. Laganà, Time dependent quantum reactive scattering on GPU, Lecture Notes in Computer Science, 6784, 428-441 (2011)
22. A. Costantini, A. Laganà, L. Pacifici, O. Gervasi, "An alternative distribution model for the molecular dynamics study of liquid propane on a Grid platform", IEEE ICCSA 2007, 433-440 ISBN 0-7695-2945-3.
23. L. Pacifici, L. Arteconi and A. Laganà, FITTING: a portal to fit potential energy functionals to ab initio points, Lecture Notes in Computer Science, 4487, 358-365 (2007).
24. O. Gervasi, S. Crocchianti, L. Pacifici, D. Skouteris, A. Laganà, Towards the Grid design of the dynamics engine of a molecular simulator, Lecture Series in Computer and Computational Science 7:1425-1428 (2006).
25. L. Arteconi, A. Laganà, L. Pacifici, A Web Based Application to Fit Potential Energy Functionals to ab initio Values, Lecture Notes in Computer Science, 3980 part I, 694- 700 (2006).
26. M. Alberti', L. Pacifici, A. Laganà and A. Aguilar, A Molecular Dynamics study for isomerization of Ar solvated (benzene)₂-K⁺ heteroclusters, Chemical Physics 327, 105-111 (2006).
27. D. Skouteris, L. Pacifici, A. Laganà, Time-dependent wavepacket calculations for the $N(^4S) + N_2(^1\Sigma_g^-)$ system on a LEPS surface: inelastic and reactive probabilities, Molecular Physics, 102, 2237-2248 (2004).
28. A. Laganà, L. Pacifici, D. Skouteris, A time dependent study of the nitrogen atom nitrogen molecule reaction, Lecture Notes in Computer Science, 3044 part II, 357-365 (2004).
29. O. Gervasi, A. Riganelli, L. Pacifici, A. Laganà, A Virtual laboratory prototype for molecular science on the Grid, Future Generation on Computer Systems, 20, 717-726 (2004).
30. A. Laganà, L. Pacifici, D. Bellucci, Parallelization strategies for quantum reactive scattering codes, Future Generation on Computer Systems, 20, 829-840 (2004).
31. A. Laganà, S. Crocchianti, N. Faginas Lago, L. Pacifici, G. Ferraro, A non orthogonal coordinate approach to atom diatom parallel reactive scattering calculations, Collection of Czechoslovak Chemical Communications 68(2), 307-330 (2003).

CURRICULUM VITAE

32. L. Pacifici, S. Crocchianti, V. Piermarini, A. Laganà, Parallel approaches to the integration of the differential equations for reactive scattering, Lecture Notes in Computer Science 2331, 909-917 (2002).

33. V. Piermarini, L. Pacifici, S. Crocchianti, A. Laganà, Parallel models for reactive scattering calculations, Lecture Notes in Computer Science 2110, 194-203 (2001).

34. V. Piermarini, L. Pacifici, S. Crocchianti, A. Laganà, G. D'Agosto, S. Tasso, Parallel methods in time dependent approaches to reactive scattering, Lecture Notes in Computer Science 2073, 567-575 (2001).

Lingue

Italiano (lingua madre)

Inglese (scritto e parlato)

Spagnolo (scritto e parlato)

Competenze personali:

- Ottima conoscenza dei sistemi operativi UNIX/Linux e dei relativi programmi;
- Ottima conoscenza del sistema operativo OSX OS e dei relativi programmi;
- Ottima conoscenza del sistema operativo Microsoft OS e dei relativi programmi;
- Estesa esperienza di programmazione con i linguaggi Fortran77, Fortran90, C, Java;
- Profonda conoscenza della Programmazione parallela e distribuita
- Ottima conoscenza del calcolo su schede grafiche (GPU)
- Profonda conoscenza di tecniche computazionali avanzate per l'analisi numerica

Dr. Leonardo Pacifici