

# Curriculum



Nome Name:	Michele
Cognome Surname:	Ceotto

ORCID:	0000-0002-8270-3409
Scopus Author ID:	n.d.
WOS Author ID:	n.d.
Sito WEB WEB site:	<a href="https://sites.unimi.it/ceotto/">https://sites.unimi.it/ceotto/</a>

## **POSIZIONE PROFESSIONALE ATTUALE / CURRENT PROFESSIONAL POSITION:**

Posizione attuale Current position:	In Servizio
Qualifica Qualification:	Professore Associato confermato
Ateneo/Ente/Azienda University/Institution/Company:	Università degli Studi di MILANO
Nazione Ateneo/Ente/Azienda University/Institution/Company Country:	ITA
Anno inizio Start Year:	2015
Anno fine End Year:	n.d.

## **PRECEDENTI ESPERIENZE LAVORATIVE (ULTIMI 10 ANNI) / PREVIOUS WORK EXPERIENCE ( LAST 10 YEARS):**

### **LINGUE / LANGUAGES:**

Lingua Language:	Inglese
Scrittura Writing:	C1
Comunicazione Communication:	C1

Lingua Language:	Spagnolo
Scrittura Writing:	C1
Comunicazione Communication:	C1

### **AREA/SETTORE SCIENTIFICO-DISCIPLINARE / AREA/SECTOR SCIENTIFIC-DISCIPLINARY**

Area scientifico-disciplinare Area scientific-disciplinary:	Scienze chimiche
Area scientifico-disciplinare codice Area scientific-disciplinary code:	03
Settore scientifico-disciplinare codice Sector scientific-disciplinary code:	-Chimica fisica
Settore scientifico-disciplinare codice Sector scientific-disciplinary code:	-CHEM-02/A

### **DESCRIZIONE DEI PRINCIPALI RISULTATI SCIENTIFICI CONSEGUITI NEGLI ULTIMI 10 ANNI (CON ANNESSO ELENCO DI MASSIMO 10 PUBBLICAZIONI) / DESCRIPTION OF THE MAIN SCIENTIFIC RESULTS ACHIEVED IN THE LAST 10 YEARS (WITH ATTACHED LIST OF MAXIMUM 10 PUBLICATIONS):**

Descrizione Description:	<i>I miei principali risultati scientifici, in parte contenuti nelle pubblicazioni sottoelencate, dimostrano che ho sviluppato una nuova metodologia teorica e computazionale per il calcolo delle frequenze di vibrazione nucleari. Il mio metodo è totalmente ab initio e basato sulla dinamica quantistica in approssimazione semiclassica, non presuppone parametri ad hoc e permette di stimare e interpretare gli spettri IR di molecole sia in fase gas e/o adsorbite su superficie che in soluzione, con una precisione di circa 10-20 numeri d'onda. Inoltre il mio metodo può calcolare completamente ab initio le autofunzioni vibrazionali quantistiche anarmoniche delle molecole e stimare gli effetti quantistici di delocalizzazione nucleare, come dimostrato per la glicinia. In aggiunta, sempre con un approccio semiclassico, ho implementato su codici open source metodi per il calcolo della costante di reazione.</i>
-----------------------------	--

## PUBBLICAZIONI / PUBLICATIONS:

Anno della pubblicazione Year of publication:	2025
Citazione Citation:	Conte, Riccardo, Mandelli, Giacomo, Botti, Giacomo, Moscato, Davide, Lanzi, Cecilia, Cazzaniga, Marco, Aieta, Chiara, Ceotto, Michele (2025). Semiclassical description of nuclear quantum effects in solvated and condensed phase molecular systems. CHEMICAL SCIENCE, vol. 16, p. 20-28, ISSN: 2041-6520, doi: 10.1039/d4sc06383j

Anno della pubblicazione Year of publication:	2021
Citazione Citation:	Alessandro Rognoni, Riccardo Conte, Michele Ceotto (2021). How many water molecules are needed to solvate one?. CHEMICAL SCIENCE, vol. 12, p. 2060-2064, ISSN: 2041-6520, doi: 10.1039/d0sc05785a

Anno della pubblicazione Year of publication:	2024
Citazione Citation:	Conte, Riccardo, Aieta, Chiara, Cazzaniga, Marco, Ceotto, Michele (2024). A Perspective on the Investigation of Spectroscopy and Kinetics of Complex Molecular Systems with Semiclassical Approaches. THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, vol. 2024, p. 7566-7576, ISSN: 1948-7185, doi: 10.1021/acs.jpcllett.4c01338

Anno della pubblicazione Year of publication:	2020
Citazione Citation:	Aieta C., Micciarelli M., Bertaina G., Ceotto M. (2020). Anharmonic quantum nuclear densities from full dimensional vibrational eigenfunctions with application to protonated glycine. NATURE COMMUNICATIONS, vol. 11, 4348, ISSN: 2041-1723, doi: 10.1038/s41467-020-18211-3

Anno della pubblicazione Year of publication:	2024
Citazione Citation:	Moscato, Davide, Mandelli, Giacomo, Bondanza, Mattia, Lipparini, Filippo, Conte, Riccardo, Mennucci, Benedetta, Ceotto, Michele (2024). Unraveling Water Solvation Effects with Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Semiclassical Vibrational Spectroscopy: The Case of Thymidine. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, vol. 146, p. 8179-8188, ISSN: 0002-7863, doi: 10.1021/jacs.3c12700

Anno della pubblicazione Year of publication:	2024
Citazione Citation:	Fallacara, Erika, Finocchi, Fabio, Cazzaniga, Marco, Chenot, Stéphane, Stankic, Slavica,

	Ceotto, Michele (2024). The fate of the formic acid proton on the anatase TiO <sub>2</sub> (101) surface. ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION, vol. 63, p. 1-8, ISSN: 1433-7851, doi: 10.1002/anie.202409523
--	---

Anno della pubblicazione Year of publication:	2017
Citazione Citation:	M. Ceotto, G. Di Liberto, R. Conte (2017). Semiclassical "divide-and-Conquer" Method for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems. PHYSICAL REVIEW LETTERS, vol. 119, p. 1-7, ISSN: 0031-9007, doi: 10.1103/PhysRevLett.119.010401

Anno della pubblicazione Year of publication:	2021
Citazione Citation:	Leonardo Lo Presti, Valentina Pifferi, Giovanni Di Liberto, Giuseppe Cappelletti, Luigi Falciola, Giuseppina Cerrato, Michele Ceotto (2021). Direct measurement and modeling of spontaneous charge migration across anatase-brookite nanoheterojunctions. JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY. A, vol. 9, p. 7782-7790, ISSN: 2050-7488, doi: 10.1039/d1ta01040a

Anno della pubblicazione Year of publication:	2018
Citazione Citation:	Gabas, Fabio, Di Liberto, Giovanni, Conte, Riccardo, Ceotto, Michele (2018). Protonated glycine supramolecular systems: The need for quantum dynamics. CHEMICAL SCIENCE, vol. 9, p. 7894-7901, ISSN: 2041-6520, doi: 10.1039/c8sc03041c

**DESCRIZIONE DEI PRINCIPALI PROGETTI DI RICERCA E PREMI CONSEGUITI NEGLI ULTIMI 10 ANNI (CON ANNESSO ELENCO DI MASSIMO 10 RISULTATI, INCLUDENDO, A TITOLO DI ESEMPIO, PRINCIPAL INVESTIGATOR O COORDINATORE LOCALE DI PROGETTI DI RICERCA COMPETITIVI NAZIONALI O INTERNAZIONALI, SIGNIFICATIVI PREMI CONSEGUITI PER LA PROPRIA ATTIVITÀ DI RICERCA)/ DESCRIPTION OF THE MAIN RESEARCH PROJECTS AND AWARDS AWARDED IN THE LAST 10 YEARS (WITH ATTACHED LIST OF MAXIMUM 10 ACHIEVEMENTS, INCLUDING, FOR EXAMPLE, PRINCIPAL INVESTIGATOR OR LOCAL COORDINATOR OF NATIONAL OR INTERNATIONAL COMPETITIVE RESEARCH PROJECTS, SIGNIFICANT AWARDS AWARDED FOR YOUR RESEARCH ACTIVITY):**

Descrizione Description:	<i>Nel 2015 ho vinto in qualità di PI (Responsabile di Progetto) un finanziamento ERC Consolidator con un progetto dal titolo "Divide and Conquer ab</i>
-----------------------------	--

	<p><i>initio Semiclassical Molecular Dynamics for Spectroscopic Calculations of Complex Systems” (acronimo SEMICOMPLEX) e per un finanziamento totale di 1 899 973 €. Grazie a SEMICOMPLEX ho potuto sviluppare le mie conoscenze acquisite durante il mio dottorato alla University of California a Berkeley presso il gruppo di W. H. Miller e il postdottorato alla University of Utah Salt Lake City presso il gruppo di G. Voth, e creare un gruppo di ricerca di dinamica molecolare quantistica in approssimazione semiclassica presso la mia Università degli Studi di Milano. Successivamente nel 2018 ho vinto un finanziamento FARE-MIUR per un totale di 182 340 € con il progetto QURE, “A theoretical-computational study of photocatalytic remediation of polluted atmospheres”, sempre in qualità di PI e che mi ha permesso di applicare le metodologie sviluppate in SEMICOMPLEX alla descrizione con la dinamica quantistica di inquinanti e VOC (composti organici volatili) adsorbiti su superfici di titania per il rimedio ambientale tramite fotocatalisi. Nel 2022 ho vinto un finanziamento ERC Proof of Concept Grant 2022, di 150 000 € (Lump Sum Grant) per il progetto SEMISOFT, “A web-platform interfaced software for spectroscopic molecular characterization and early diagnosis of Parkinson's disease”, sempre in qualità di PI. In collaborazione con il Laboratorio di Analisi Raman dell’Ospedale don Gnocchi, questo finanziamento ha permesso di mettere le basi per lo sviluppo di un metodo diagnostico precoce del Parkinson. Dal 2023, in qualità di tutor della dott.ssa Chiara Aieta supervisiono, in collaborazione con la collega S. Hammes-Schiffer (Princeton University), il progetto Marie Curie Individual Fellowship di tipo Global dal titolo “Post Born-Oppenheimer Approximation for Semiclassical Spectroscopy Investigation of Proton-Coupled Electron Transfer Processes (NEOSC)”, per un totale di 288 859 €. Dal 2024, in qualità di tutor del dott. Hampus Karlsson, supervisiono il progetto Marie Curie Individual Fellowship di tipo European dal titolo “Semiclassical Spin Dynamics in Condensed Phase (SCSD)”, per un totale di 188.590,08€</i></p>
--	--

Descrizione Description:	2015-2022 ERC Consolidator Grant 2014, 1 899 973 € per il progetto SEMICOMPLEX, PI (Responsabile di Progetto)
-----------------------------	---

Descrizione Description:	2022-2024 ERC Proof of Concept Grant 2022, 150 000 € Lump Sum Grant per il progetto SEMISOFT, PI (Responsabile di Progetto).
-----------------------------	--

Descrizione Description:	2018-2022 FARE-MIUR, 182 340 € per il progetto QURE, PI (Responsabile di Progetto)
-----------------------------	--

Descrizione Description:	2024-2027 Supervisor for the project MC Individual Fellowship (call: HORIZON-MSCA-2022-PF-01; type of action: HORIZON TMA MSCA
-----------------------------	--

	Postdoctoral Fellowships - Global Fellowships) "Post Born-Oppenheimer Approximation for Semiclassical Spectroscopy Investigation of Proton-Coupled Electron Transfer Processes (NEOSC)", Euro 288.859,20. Starting date: 01/02/2024; ending date: 31/01/2027, Dott.ssa Chiara Aieta grantee.
--	---

Descrizione Description:	2024-2026 Supervisor for the project Marie Curie Individual Fellowship (call: HORIZON-MSCA- 2023-PF-01; type of action: HORIZON TMA MSCA Postdoctoral Fellowships - European Fellowships) "Semiclassical Spin Dynamics in Condensed Phase (SCSD)", Euro 188.590,08. Starting date: 01/10/2024; ending date: 31/12/2026, Dott. Hampus Karlsson grantee.
-----------------------------	--

**DESCRIZIONE DEI PRINCIPALI RISULTATI CONSEGUITI NEGLI ULTIMI 10 ANNI IN TERMINI DI SVILUPPO DI RETI E RELAZIONI SCIENTIFICHE NAZIONALI E INTERNAZIONALI (CON ANNESSO ELENCO DI MASSIMO 5 RISULTATI, INCLUDENDO, A TITOLO DI ESEMPIO, PARTECIPAZIONE O ORGANIZZAZIONE DI CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI; CONTRIBUTI A CONSORZI DI RICERCA) / DESCRIPTION OF THE MAIN RESULTS ACHIEVED IN THE LAST 10 YEARS IN TERMS OF DEVELOPMENT OF NATIONAL AND INTERNATIONAL SCIENTIFIC NETWORKS AND RELATIONS (WITH ATTACHED LIST OF MAXIMUM 5 RESULTS, INCLUDING, FOR EXAMPLE, PARTICIPATION OR ORGANIZATION OF NATIONAL AND INTERNATIONAL CONFERENCES; CONTRIBUTIONS TO RESEARCH CONSORTIA):**

Descrizione Description:	<i>Per sviluppare una rete di scambio di conoscenze scientifiche e di eventuali collaborazioni, ho sfruttato soprattutto il CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire) che è costituito da diversi nodi con base presso l'EPFL a Lausanne per l'organizzazione di workshop insieme ad altri colleghi. Le modalità di questi workshop sono tali da permettere ampie presentazioni lasciando spazio a domande e discussioni, con diverse tavole rotonde informali. In questo modo siamo riusciti a creare una comunità di dinamica quantistica molecolare viva e collaborativa. Inoltre tra le mie collaborazioni attivate segnalo quella con il gruppo di Dominik Marx (chimico teorico) e Martina Havenith (spettroscopista), entrambi presso la Bochum University (Germany), per lo studio della microsolvatazione. E quello con il gruppo di F. Finocchi (fisico teorico della materia) e S. Stankic (spettroscopista), entrambi presso l'Institut des NanoSciences de Paris (INSP), CNRS and Sorbonne Université, per lo studio di adsorbimento di composti organici volatili su superficie di titania. Più recentemente sto collaborando con E. Pollak (Weizman Institute, Israel) per lo studio degli effetti nonadiabatici.</i>
-----------------------------	--

Descrizione Description:	5-7 September 2022: CECAM Workshop: "Theories of molecular processes and spectra based on the quantum-classical synergy", Bordeaux, France; <a href="https://www.cecarn.org/workshop-details/1044">https://www.cecarn.org/workshop-details/1044</a>
-----------------------------	--

Descrizione Description:	13-17 June 2022: CECAM Workshop: "Challenges of molecular spectroscopy: Theory meets experiment", Lausanne, Switzerland; <a href="https://www.cecarn.org/workshop-details/1034">https://www.cecarn.org/workshop-details/1034</a>
-----------------------------	---

Descrizione Description:	XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana "SCI 2021", "La Chimica guida lo sviluppo sostenibile", 14-23 September 2021; Local organizer for the "Division of Theoretical and Computational Chemistry"
-----------------------------	--

Descrizione Description:	6-10 June 2016: CECAM Workshop: "Different routes to quantum molecular dynamics", Lausanne, Switzerland; <a href="https://www.cecarn.org/workshop-1319.html">https://www.cecarn.org/workshop-1319.html</a>
-----------------------------	---

**DESCRIZIONE DEI PRINCIPALI RISULTATI CONSEGUITI NEGLI ULTIMI 10 ANNI IN TERMINI DI SUPPORTO ALLA COMUNITÀ SCIENTIFICA (CON ANNESSO ELENCO DI MASSIMO 5 RISULTATI, INCLUDENDO, A TITOLO DI ESEMPIO, RESPONSABILITÀ DI DIREZIONE DI COMITATI EDITORIALI; INCARICHI DI VALUTAZIONE DELLA RICERCA PRESSO ISTITUZIONI NAZIONALI O INTERNAZIONALI; RESPONSABILITÀ ISTITUZIONALI ALL'INTERNO DELL'ISTITUZIONE DI APPARTENENZA O DI ALTRE ISTITUZIONI) / DESCRIPTION OF THE MAIN RESULTS ACHIEVED IN THE LAST 10 YEARS IN TERMS OF SUPPORT TO THE SCIENTIFIC COMMUNITY (WITH ATTACHED LIST OF MAXIMUM 5 RESULTS, INCLUDING, FOR EXAMPLE, MANAGEMENT RESPONSIBILITIES OF EDITORIAL COMMITTEES; RESEARCH EVALUATION ROLES AT NATIONAL OR INTERNATIONAL INSTITUTIONS; INSTITUTIONAL RESPONSIBILITIES WITHIN THE INSTITUTION OF AFFILIATION OR OTHER INSTITUTIONS):**

Descrizione Description:	
-----------------------------	--

**DESCRIZIONE DEI PRINCIPALI RISULTATI CONSEGUITI NEGLI ULTIMI 10 ANNI IN TERMINI VALORIZZAZIONE DELLE CONOSCENZE (CON ANNESSO ELENCO DI MASSIMO 3 RISULTATI, RELATIVI ALLA PARTECIPAZIONE DEL CANDIDATO**

**ALLE ATTIVITÀ DI VALORIZZAZIONE DELLE CONOSCENZE) /  
DESCRIPTION OF THE MAIN RESULTS ACHIEVED IN THE LAST 10  
YEARS IN TERMS OF KNOWLEDGE VALORIZATION (WITH  
ATTACHED LIST OF MAXIMUM 3 RESULTS, RELATING TO THE  
CANDIDATE'S PARTICIPATION IN KNOWLEDGE VALORIZATION  
ACTIVITIES):**

<p>Descrizione Description:</p>	<p>1) Sviluppo dal 2015 il software Multiwell a licenza GPL, ad uso pubblico della Michigan University per trasferire tutte le più recenti teorie e metodologie sviluppate dal mio gruppo di ricerca alla comunità scientifica e al privato. <a href="https://multiwell.engin.umich.edu/">https://multiwell.engin.umich.edu/</a> 2) Da maggio 2022 attraverso finanziamento ERC-POC ho avviato un processo di trasferimento tecnologico delle tecniche sviluppate nel mio progetto ERC-CoG ad enti privati. Lo "stakeholder" è il laboratorio di nanomedicina dell'Ospedale don Gnocchi. Un piano per testare il mercato e di individuazione del miglior processo di commercializzazione è stato approvato nel grant ed è in corso di esecuzione con la collaborazione dell'ufficio per il trasferimento tecnologico (TTO) di Ateneo. 3) Ho organizzato una "Nobel Lecture" (8/4/16) tenuta dal Prof. Martin Karplus (Harvard University) premio Nobel per la Chimica 2013 presso l'aula Magna dell'Università degli Studi di Milano. All'evento hanno partecipato studenti universitari e delle scuole superiori lombarde e delle scuole secondarie di primo grado milanesi per un totale di circa un migliaio di persone. E' seguita la divulgazione scientifica con articolo in rivista di interesse generale: C. Aieta, G. Di Liberto, F. Gabas, R. Conte, and M. Ceotto, "Viaggio a Bordo di un Nanomotore guidato da Martin Karplus", Nuova Energia 2, (2016). 4) Divulgazione presso le scuole superiori di introduzione alla chimica e meccanica quantistica, ai finanziamenti per la ricerca della Comunità Europea. Ho partecipato alla notte dei Ricercatori con l'attività "MeetMe Tonight" (29-30/9/17), evento organizzato dalla Comunità Europea in tutta Europa, illustrando la mia attività di ricerca insieme ad altri vincitori ERC milanesi presso il pubblico per i 10 anni di fondazione dell'ERC. Ho partecipato all'attività "A tu per tu con la ricerca - Speed Date": 21-12-2017, "ERC Campioni della Ricerca e Professioni STEM" organizzato dal Museo Nazionale della Scienza e della Tecnologia Leonardo da Vinci di Milano per le scuole superiori. Infine con un intervento su invito all'adunanza annuale dell'Istituto Lombardo di Scienze e Lettere nel 2021, sempre come attività di divulgazione attraverso la presentazione: "Qual è la più piccola goccia d'acqua?", Istituto Lombardo - Accademia di Scienze e Lettere - Rendiconti di Scienze, 155 (2021) 5) Nel 2019 ho ideato e sviluppato un video a carattere altamente divulgativo mediante il supporto tecnico del Centro per l'Innovazione Didattica e le Tecnologie Multimediali dell'Università degli Studi di Milano con il finanziamento di Fondazione Cariplo e Regione Lombardia dove accosto l'arte</p>
-------------------------------------	---

	<p>della Fuga con la razionalizzazione dei moti molecolari. <a href="https://video.unimi.it/media/1770/6">https://video.unimi.it/media/1770/6</a>)</p> <p>Piano Lauree Scientifiche (PLS): dal 2011 responsabilità, creazione e sviluppo del Test di Autovalutazione (attività obbligatoria PLS secondo le direttive MIUR) in chimica composto da un database di circa 700 domande ed erogato da remoto.</p>
--	--

<p>Descrizione Description:</p>	<p>MultiWell suite of codes developer (<a href="https://clasp-research.engin.umich.edu/multiwell/">https://clasp-research.engin.umich.edu/multiwell/</a>)</p>
-------------------------------------	---

<p>Descrizione Description:</p>	<p>8 April 2016: NOBEL LECTURE Prof. Martin Karplus (Harvard University) 2013 Nobel Prize in Chemistry</p>
-------------------------------------	--

<p>Descrizione Description:</p>	<p>Dal 2011 Piano Lauree Scientifiche (PLS): creazione e sviluppo di un testo di autovalutazione in chimica composto da un database di ~700 domande. Il test è condotto da ~1000 studenti della scuole superiori lombarde ogni anno. The test è scritto in modo da testare le competenze e non le conoscenze.</p>
-------------------------------------	---

**Informazioni aggiornate alla data di candidatura 21-05-2025**

**Michele Ceotto**

*Il presente curriculum costituisce allegato e parte integrante dell'incarico sottoscritto*