

## CURRICULUM VITAE del Dr. Leonardo Belpassi

### Titoli, ruoli ricoperti ed incarichi

- **Luglio 2002: Laurea in Chimica** (quinquennale, V.O.), indirizzo Chimica Fisica, in data 19/07/2002, presso l'Università degli Studi di Perugia, con votazione 110/110. Titolo della tesi: "Calcolo ab-initio di superfici di energia elettronica e loro applicazioni in dinamica molecolare", relatore Prof. Francesco Tarantelli. Diploma rilasciato il 20 marzo 2003 dall'Università degli Studi di Perugia, Rettore Prof. Francesco Bistoni.
- **Novembre 2002-Ottobre 2005:** Borsa di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Perugia, Gruppo di Chimica Inorganica Teorica coordinato dal Prof. A. Sgamellotti.
- **27 Gennaio 2006:** conseguimento del **Titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche** presso l'Università di Perugia, XVIII ciclo di Dottorato della durata triennale; titolo della tesi: "A Dirac-Kohn-Sham approach to the study of the electronic structure of molecular systems containing heavy atoms". Certificato rilasciato dall'Università degli Studi di Perugia il 18/01/2010. Compilatore: Tiziana Pimpinichio, d'ordine del direttore amministrativo responsabile dell'area: D.ssa Elisabetta Brunetti. Registrato al numero 18.
- **Dal 01/11/2005 al 30/11/2010** è risultato vincitore dell'assegno per la collaborazione ed attività di ricerca (**assegni di ricerca**) dell'Università di Perugia, nell'ambito dell'Area 03- Scienze Chimiche e Farmaceutiche, relativamente al progetto "Effetti relativistici sulla struttura elettronica e le proprietà di sistemi molecolari. Metodo DFT a quattro componenti", coordinato dal Prof. F. Tarantelli.
- **Dal 17/10/2011 al 01/03/2020:** riveste la posizione di **Ricercatore III livello presso il Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR)**, profilo Ricercatore III livello. Struttura di appartenenza: Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari-Sez. Perugia. Area Scientifica di Competenza: Scienze Chimiche. Matricola: 14452.
- **Dal 02/03/2020 ad oggi:** riveste la posizione di **Ricercatore II livello presso il Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR)**, profilo Ricercatore II livello. Struttura di appartenenza: Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche-Sez. Perugia. Area Scientifica di Competenza: Scienze Chimiche. Matricola: 14452.
- **Dal 01/01/2017 ad oggi:** ricopre il ruolo di **economo/cassiere per l'Istituto CNR UOS sede di Perugia**. Amministrazione CNR. Area Organizzativa CNR-ISTM. Prot. n. 000088. Data, 21/02/2017.
- **Dal 2016 ad oggi:** è responsabile del Progetto del Dipartimento di Scienze Chimiche e Tecnologie dei materiali del CNR, area progettuale prevalente DCM.AD001 *Chimica Verde e Processi Sostenibili* denominato "FIRB-AuCat - Nuovi catalizzatori molecolari di Au(I): da know-how a know-why" (Piani di Gestione, codice rif. DCM.AD001.133). Finanziamento ottenuto autonomamente da enti esterni al CNR.
- **Dal 06/11/2013 ad oggi:** è membro del Collegio dei Docenti della Scuola di Dottorato in "Scienze Chimiche" dell'Università degli Studi di Perugia. Designazione approvata con decreto del Direttore della Scuola di dottorato di ricerca in "Scienze

Matematiche, Fisiche, Informatiche, Chimiche, Geologiche e Farmaceutiche" in data 6/11/2013. Responsabile del provvedimento Tiziana Pimpinichio, Dirigente Dott.ssa Laura Paulucci. Atto dell'Amministrazione Centrale dell'Università degli Studi di Perugia, Amministrazione Centrale. Prot. 2013/0036800 del 29/11/2013.

- **Dal 08/03/2012 al 08/03/2016:** ha rivestito il ruolo di Principal Investigator del progetto Furb-Futuro in Ricerca 2010 (RBFR1022UQ) coordinando in prima persona l'attività di ricerca di 2 PhD (di durata triennale) e 2 Post Doc (di durata triennale).
- **Dal 01/11/2021 ad oggi** è membro effettivo del Gruppo di Lavoro SCITEC "Chimica Verde e Materiali per la Sostenibilità". Provvedimento di nomina disposto dal Direttore, Salvatore Iannace, il 24/05/2023.

### Partecipazione a Scuole e Corsi

- Agosto 2002: "Summer School in Molecular Physics and Quantum Chemistry", Oxford, Inghilterra.
- Luglio 2003: "12a Scuola Estiva di Calcolo Parallelo", CINECA, Casalecchio di Reno (BO), Italia.
- Durante il periodo del dottorato ha seguito due corsi di lezioni presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Perugia: Elettrodinamica Quantistica (Prof. Y. Srivastava): 48 ore di lezione, MarzoGiugno 2004 e Fisica Teorica (Prof. P. Sodano): 48 ore di lezione, MarzoGiugno 2004.
- Maggio 2004: "Corso di FORTRAN 90", CINECA, Casalecchio di Reno (BO), Italia.
- Dicembre 2004: "Winter School in Theoretical Chemistry 2004. A Frontier of Chemistry: New Species", Helsinki, Finlandia.
- Giugno 2008: Corso "Introduzione al linguaggio C per la programmazione scientifica", CINECA, Casalecchio di Reno (BO), Italia.
- Giugno 2008: Corso "Dal C alla programmazione ad oggetti C++", CINECA, Casalecchio di Reno (BO), Italia.
- Maggio 2015: Corso "HPC code modernization for Intel Xeon & Intel Phi", Corso organizzato da ADALTA. Rif. Attestato di partecipazione disponibile: [https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli\\_concorso/src/master/attestatoHPC2015.pdf](https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli_concorso/src/master/attestatoHPC2015.pdf)
- Marzo 8-11 2018: Corso "Introduction to Modern Fortran", Corso organizzato da CINECA, Roma. Rif. Attestato di partecipazione disponibile: [https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli\\_concorso/src/master/attestaoHPC2018.pdf](https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli_concorso/src/master/attestaoHPC2018.pdf)
- Marzo 11-13 2019: Corso "Debugging and Optimization of Scientific Applications", Corso organizzato da CINECA, Roma. Rif.
- Febbraio 6-8 2019: Corso "Introduction to Python programming", Corso organizzato da CINECA, Roma. Rif.
- 15 e 16 Dicembre 2021: Corso "Workshop Quantum Computing and High Performance Computing 4th edition", Corso organizzato da CINECA, Roma. Rif. Attestato di

partecipazione disponibile:

[https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli\\_concorso/src/master/QC2022.pdf](https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli_concorso/src/master/QC2022.pdf)

- dal 28 Novembre al 01 Dicembre 2022: "36<sup>th</sup> Winter School in Theoretical Chemistry: Quantum Computers for Chemistry ", 23 lezioni di 45 min Corso organizzato dal Department of Chemistry University of Helsinki, Finland. Rif. Attestato di partecipazione disponibile:

[https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli\\_concorso/src/master/certpart\\_quantum\\_2022.pdf](https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli_concorso/src/master/certpart_quantum_2022.pdf)

### Riconoscimenti nazionali

- Ha conseguito l'**Abilitazione Scientifica Nazionale** alle funzioni di Professore Universitario di Seconda fascia nella tornata 2012 (Decreto Direttoriale 222 del 20 luglio 2012). Settore concorsuale **03/A2-Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche**. Abilitazione valida dal 29/01/2014 al 29/01/2020.  
Accesso agli atti-elenco abilitati ASN: <http://abilitazione.miur.it/public/pubblicarisultati.php>.
- Ha conseguito l'**Abilitazione Scientifica Nazionale** alle funzioni di Professore Universitario di Seconda fascia nella tornata 2012 (Decreto Direttoriale 222 del 20 luglio 2012). Settore concorsuale **03/B1-Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici**. Abilitazione valida dal 23/12/2013 al 23/12/2019.  
Accesso agli atti-elenco abilitati ASN: <http://abilitazione.miur.it/public/pubblicarisultati.php>.
- Ha conseguito l'**Abilitazione Scientifica Nazionale** alle funzioni di Professore Universitario di **Prima fascia** nella tornata 2016-2018. Settore concorsuale **03/B1-Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici**. Abilitazione valida dal 07/08/2018 al 07/08/2027.  
Accesso agli atti-elenco abilitati ASN: <http://abilitazione.miur.it/public/pubblicarisultati.php>.
- Ha conseguito l'**Abilitazione Scientifica Nazionale** alle funzioni di Professore Universitario di **Prima fascia** nella tornata 2016-2018. Settore concorsuale **03/A2-Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche**. Abilitazione valida dal 31/07/2018 al 31/07/2027.  
Accesso agli atti-elenco abilitati ASN: <http://abilitazione.miur.it/public/pubblicarisultati.php>.

### Conseguimento di Grant nazionali/internazionali, responsabilità progetti

- Vincitore come **Principal Investigator** del prestigioso Grant **Firb-Futuro in Ricerca Bando 2010** (Decreto Direttoriale 27 settembre 2010 n. 584/ricl. del MIUR) con il progetto: "*Nuovi catalizzatori molecolari di Au(I): da know-how a know-why. (AuCat)*" Settori ERC: PE Physical Science and Engineering, PE4-Physical and Analytical Chemical sciences: analytical chemistry, chemical theory, physical chemistry/chemical physics, PE5-Materials and Synthesis: materials synthesis, structure-properties relations, functional and advanced materials, molecular architecture, organic chemistry. Decorrenza progetto: dal 08/03/2012 al 08/03/2016. Progetto assegnato e passato al CNR dal 17/10/2011 con decreto MIUR del 9 novembre 2011 n. 928. Costo ammesso di 1.008.000 euro (contributo MIUR 849.600 euro). Codice: RBFR1022UQ. Finalità:

contribuire in modo significativo alla comprensione dei meccanismi fondamentali della chimica dei catalizzatori a base di metalli da conio, in particolare quelli di oro(I), specialmente in fase omogenea. Risultati: numerose pubblicazioni (oltre 30) su riviste internazionali che dimostrano i risultati raggiunti in: 1) Sintesi e caratterizzazione strutturale attraverso tecniche NMR avanzate di nuovi precursori catalitici di Au(I), delle coppie ioniche in soluzione risultanti dalla loro attivazione e dove possibile di intermedi di reazione; 2) Applicazione di metodologie di High Throughput Experimentation (HTE) su catalizzatori di Au(I) per lo screening catalitico e lo studio efficiente e rapido della correlazione fra struttura e attività catalitica; 3) Comprensione dettagliata, attraverso lo sviluppo di originali strumenti teorico-computazionali, della natura del legame chimico fra metallo e substrato insaturo attivato, e dei meccanismi di reazione in diverse condizioni.

- Vincitore come **Principal Investigator** del progetto ISCRA (Project: IsB05). Titolo: BERTHA. Science Domain: Computational Chemistry. Validity: Wednesday, 31 October, 2012 to Thursday, 31 October, 2013. Progetto ha ottenuto un budget di 400000 cpu/h di calcolo presso la macchina HPC FERMI (CINECA). Riferimento: file pdf in repository pubblico:  
[https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli\\_concorso/src/master/BERTHAUserDBCINECA.pdf](https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli_concorso/src/master/BERTHAUserDBCINECA.pdf).

### Partecipazione ad altri progetti

- Progetto "FP7-NMP-2009: Sensitized activated solar cells (SANS)". Istituzione finanziatrice: Progetto europeo settimo programma quadro. Importo totale finanziamento di 3.991.060 euro. Importo per unità 376.440 euro. Numero contratto 246124. Atto di conferimento n. 246124 del 14/12/2010. Altri partners: Oxford University, EPFL, Uppsala University, Dyesol, Greatcell Solar, Demokritos. Periodo di attività dal 10/01/2011 al 31/12/2013.
- Progetto "IIT-SEED-2009: Highly efficient modeling of hybrid organic solar cells (HELYOS)". Istituzione finanziatrice: Progetti SEED dell'Istituto Italiano di Tecnologia, soggetti a valutazione esterna, importo totale finanziamento 41000 euro. Lettera di conferimento Prot. n. 21527, Atto di conferimento 23/12/2009. Altri partners: CNR-ICCOM. Periodo di attività dal 01/03/2010 al 01/03/2013.
- Progetto "Efficient Solar Cells based on Organic and hybrid Technology (ESCORT)". Istituzione finanziatrice: Progetto Europeo Settimo Programma Quadro, importo totale finanziamento 1341166 euro. Importo finanziamento per Unità Operativa 393765. Progetto coordinato dal Dr. Filippo De Angelis (CNR-ISTM). Contratto n. 261920 data 28/07/2010. Periodo di attività dal 01/09/2010 al 31/08/2014. Finalità del progetto: Il consorzio unisce le competenze nel campo delle DSSC nell'UE e in India, nonché l'utilizzo creativo dell'ingegneria molecolare e i recenti progressi nel campo delle nanotecnologie per sviluppare nuovi materiali e processi finalizzati ad un aumento significativo dell'efficacia di conversione DSSC.

- Progetto "Energia da Fonti Rinnovabili (EFOR)". Istituzione finanziatrice: CNR (Progetti CNR per il Mezzogiorno). Importo totale finanziamento 4.940.000. Importo finanziamento per Unità Operativa 170.500. Progetto coordinato dal Dr. Giuseppe Gigli, Istituto CNR Nanoscienze Lecce. Riferimenti: delibera n.74/2011 Verb. 172 del 29 Marzo 2011 Consiglio di Amministrazione del CNR. Periodo di attività dal 01/07/2011 al 30/06/2015.

### Altri riconoscimenti

- **Luglio-Ottobre 2001: Borsa di studio.** Durante il periodo di tesi di laurea, nell'ambito del progetto europeo di scambio interuniversitario SOCRATES-ERASMUS, svolge attività di ricerca presso il gruppo di Chimica Teorica della School of Chemistry di Bristol (UK) diretto dal Prof. Gabriel Balint-Kurti. Certificazione Erasmus rilasciata dall'Università degli Studi di Perugia il 18 gennaio 2010. Prot. Nr. 1/2010.
- **Maggio-Luglio 2006: Borsa di studio** nell'ambito del progetto europeo **HPC-Europa** (RII3-CT-2003-506079), presso il gruppo di Chimica Teorica della Vrije Universiteit di Amsterdam (Olanda), coordinato dal Prof. Lucas Visscher. Certificazione HPC-Europa (RII3-CT-2003-506079), rilasciata dal coordinatore del progetto HPC-Europa Transnational Access, Judy Hardy. 11 Aprile 2006.
- **Giugno-Settembre 2019: Borsa di mobilità'** nell'ambito del progetto europeo **HPC-Europa3** (INFRAIA-2016-1-730897), presso il gruppo di Chimica Teorica presso in Dipartimento di Chimica dell' Università' di Edimburgo (UK), coordinato dal Prof. Adam Kirrander. Certificazione HPC-Europa3, rilasciata dal coordinatore del progetto HPC-Europa Transnational Access.

### Partecipazione a comitati editoriali (Editorial Board) di riviste scientifiche

- **dal 2020 ad oggi:** è membro del Editorial Board della Rivista scientifica *Molecules*, IF=4.6, EISSN 1420-3049, Published by MDPI. La rivista si occupa di diversi settori della chimica incluso la chimica organica ed inorganica, chimica teorica, catalisi e green chemistry. La rivista prevede un processo di revisione tra pari. Attività svolta: scelta dei referee, analisi referaggi e selezione prodotti editoriali. Riferimento: sito web della rivista, sessione Editorial Board: <https://www.mdpi.com/journal/molecules/editors?search=Leon>
- **dal 04/01/2023** è stato nominato come Guest Editor per la rivista *Molecular Physics*, IF=1.9, Print ISSN: 0026-8976 Online ISSN: 1362-3028. Published by Taylor&Francis. La rivista si occupa di diversi settori delle scienze all'interfaccia tra la chimica e la fisica. Attività: coordinamento e selezione contributi per la Special Issue REHE2020/2022 relativa ai contributi presentati all'13th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics, tenutasi ad Assisi dal 26 al 30 Settembre 2022. Nomina di Guest editor ricevuta via e-mail il 04/01/2023 da parte del Prof. Jackson, George (g.jackson@imperial.ac.uk) Professor of Chemical Physics, Chemical Engineering Department, Imperial College London e editore in capo del Editorial Board della rivista (<https://www.tandfonline.com/action/journalInformation?show=editorialBoard&journal>

### **Coordinamento di congressi o eventi scientifici nazionali o internazionali**

- Ruolo: Presidenza e Coordinamento Scientifico. Titolo: "13<sup>th</sup> International conference on Relativistic Effects in Heavy-Element chemistry and physics" Luogo: BV Grand Hotel Assisi, Assisi, Italy. Data: dal 26 al 30 Settembre 2022. Riferimenti: sito web della conferenza (<https://www.rehe2020.it>). Book of abstracts depositato (DOI:10.5281/zenodo.8134147) e liberamente disponibile al sito: <https://doi.org/10.5281/zenodo.8134147>. Attività svolta: responsabile Scientifico con selezione dei temi scientifici della conferenza, selezione scientifica ed invito speakers, ruolo di responsabile della valutazione premi poster e presidente della commissione giudicatrice per l'assegnazione della prossima edizione della conferenza (Groningen, REHE2024). Attività di supervisione dello staff (6 persone in tutto) per dell'organizzazione logistica, incluso contatti con il responsabile della location e responsabili altri servizi. Inizialmente pensata per il 2020 la conferenza, causa COVID, è stata posticipata al 2022 e, così con l'intento di attenuare gli evidenti disagi (sia di natura scientifica e che relazionale) ho organizzato una intensa attività di seminari on-line legati alla conferenza stessa (<https://www.rehe2020.it/index.php/welcome-to-virtual-talks-program/>). Il carattere internazionale della conferenza è evidente dalla presenza di scienziati dagli USA, Giappone, Nuova Zelanda e Russia e si può evincere dal sito web della conferenza stessa. Documentazione di riferimento: oltre al sito web si veda anche il book of abstracts depositato (DOI:10.5281/zenodo.8134147) e liberamente disponibile al sito: <https://doi.org/10.5281/zenodo.8134147>. Altre informazioni: La conferenza ha un carattere spiccatamente internazionale evidente dalla presenza principalmente di scienziati dagli USA, Giappone, Nuova Zelanda, Russia e nord-Europa. Il livello della commissione scientifica che mi sono onorato di presiedere è di livello indiscusso, tra gli altri Angela K. Wilson Michigan State University, US (presidente 2022 della American Chemical Society); Pekka Pyykkö, University of Helsinki, FI; Peter A. Schwerdtfeger Massey University Auckland, NZ; Trond Saue, CNRS, FR; Wenjian Liu, Shandong University, CN.

### **Attività didattica, incarichi di docenza in corsi di alta formazione**

- Nell'anno accademico 2014/2015 ha tenuto in piena autonomia l'insegnamento di "Chimica Quantistica Molecolare" nel corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia. Ore effettuate n. 63 (CFU n. 9) di lezioni frontali. Contratto stipulato il 04/03/2015 tra Università degli Studi di Perugia, rappresentata dal Prof. Franco Moriconi nella sua qualità di Rettore, ed il Dr. Belpassi, quale esperto di alta qualificazione. Registrato al n. 180/2015 dei contratti di lavoro autonomo dell'Università degli Studi di Perugia.
- Nell'anno accademico 2015/2016 ha tenuto in piena autonomia l'insegnamento di "Chimica Quantistica Molecolare" nel corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia. Ore effettuate n. 63 (CFU n. 9) di lezioni frontali. Contratto stipulato il 14/03/2016

tra Università degli Studi di Perugia, rappresentata dal Prof. Franco Moriconi nella sua qualità di Rettore, ed il Dr. Belpassi, quale esperto di alta qualificazione. Registrato al n. 173/2016 dei contratti di lavoro autonomo dell'Università degli Studi di Perugia.

- Nell'anno accademico 2016/2017 ha tenuto in piena autonomia l'insegnamento di "Chimica Quantistica Molecolare" nel corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia. Ore effettuate n. 63 (CFU n. 9) di lezioni frontali. Contratto stipulato 13/03/2017 tra Università degli Studi di Perugia, rappresentata dal Prof. Franco Moriconi nella sua qualità di Rettore, ed il Dr. Belpassi, quale esperto di alta qualificazione. Registrato al n. 207 dei contratti di lavoro autonomo dell'Università degli Studi di Perugia.
- Nell'anno accademico 2017/2018 ha tenuto in piena autonomia l'insegnamento di "Chimica Quantistica Molecolare" nel corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia. Ore effettuate n. 63 (CFU n. 9) di lezioni frontali. Contratto stipulato Università degli Studi di Perugia, rappresentata dal Prof. Franco Moriconi nella sua qualità di Rettore, ed il Dr. Belpassi, quale esperto di alta qualificazione.
- Nell'anno accademico 2021/2022 ha ottenuto l'assegnazione ufficiale dell'insegnamento di "Inorganic Quantum Chemistry" nel corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università degli Studi di Perugia. Ore n. 83 (CFU n. 9). D. D. N. 115/2021 Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia, firmato dal Direttore del Dipartimento Prof. Alceo Macchioni. Registrato al n.6/DCBB L.240/2010 dei contratti di lavoro autonomo dell'Università degli Studi di Perugia.
- 2012, 2016 e 2018: Lectures at European Master in Theoretical Chemistry and computational Modeling (TCCM), held in Perugia, on the Relativistic Effects in Chemistry: four- and two- component methods and Chemical bond and catalysis, 8 ore frontali.

#### **Partecipazioni a commissioni, commissioni di valutazione**

- Ruolo: membro presidente. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR dal titolo "Sviluppo di nuovi metodi teorici basati sullo studio della densità elettronica per l'analisi del legame chimico in sistemi molecolari di Au(I)" (bando ISTM-AR.PG.14). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 367 del 01/08/2012.
- Ruolo: membro presidente. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR dal titolo "Sviluppo computazionale di nuovi metodi teorici basati sull'approccio relativistico a quattro componenti e sue applicazioni in sistemi organometallici contenenti atomi pesanti" (bando ISTM-AR.PG.18). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 22 del 15/01/2013.
- Ruolo: membro presidente. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR dal titolo "Catalizzatori organometallici per reazioni di trasferimento di idrogeno" (bando ISTM-PG-001-2016-AR).

- Ruolo: membro effettivo. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR (bando ISTM.AR.PG.08). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 40 del 19/01/2012.
- Ruolo: membro effettivo. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR (bando ISTM.AR.PG.09). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 41 del 19/01/2012.
- Ruolo: membro effettivo. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR (bando ISTM-PG-002-2015-AR). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 471 del 21/08/2015.
- Ruolo: membro effettivo. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR (bando ISTM-23-2013-PG). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 340 del 12/06/2013.
- Ruolo: membro effettivo. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR (bando ISTM-24-2013-PG). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 341 del 12/06/2013.
- Ruolo: membro effettivo. Commissione giudicatrice della selezione di n. 1 assegno di ricerca CNR (bando ISTM-PG-003-2014-AR). Rif.Prot. ISTM-CNR-ISTM n. 588 del 09/10/2014.

#### **Incarico di relatore per tesi di Laurea, Dottorato**

- A.A. 2021-2022: tesi di Dottorato del Dr. Diego Sorbelli, corso triennale. Titolo: "From standard to unconventional electronic structure in gold complexes: in silico studies for applications in catalysis and small molecule activation" Corso di Dottorato in Scienze Chimiche. Ciclo XXXV, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia. [http://www.dcbb.unipg.it/images/CONSIGLIO/PhD\\_STUD](http://www.dcbb.unipg.it/images/CONSIGLIO/PhD_STUD) Rif. verbali scuola di dottorato A.A. 2021-2022, Resp. Prof. Luigi Vaccaro. Tesi di Dottorato, Università degli Studi di Perugia, depositata presso le Biblioteche di Roma e Firenze.
- A.A. 2019-2020: tesi di Dottorato del Dr. Matteo De Santis, corso triennale. Titolo: "Advanced computational strategies in the dirac-kohn-sham framework: optical properties in the strong spin-orbit coupling regime and strong field" Corso di Dottorato in Scienze Chimiche. Ciclo XXXIII, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia. <http://www.dcbb.unipg.it/images/I> Rif. verbali scuola di dottorato A.A. 2019-2020, Resp. Prof. Luigi Vaccaro. Tesi di Dottorato, Università degli Studi di Perugia, depositata presso le Biblioteche di Roma e Firenze.
- \* A.A. 2015-2016: tesi di Dottorato del Dr. Carlo Alberto Gaggioli, corso triennale. Titolo: "Bond Structure and Reactivity in homogeneous Gold Catalysis" Corso di Dottorato in Scienze Chimiche e Farmaceutiche. Ciclo XXVIX, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali scuola di dottorato A.A. 2015-2016, Resp.

Prof. Ferdinando Pizzo. Tesi di Dottorato, Università degli Studi di Perugia, depositata presso le Biblioteche di Roma e Firenze.

- \* A.A. 2014-2015: tesi di Dottorato del Dr. Giovanni Bistoni, corso triennale. Titolo: "Towards a quantitative Dewar-Chatt-Duncanson model of the coordination bond: how donation and backdonation can be computed and experimentally measured." Corso di Dottorato in Scienze Chimiche Ciclo XXVIII, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali scuola di dottorato A.A. 2014-2015 responsabile Prof. Ferdinando Pizzo. Tesi di Dottorato, Università degli Studi di Perugia, depositata presso le Biblioteche di Roma e Firenze.
- \* A.A. 2014-2015: tesi di laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dr. Matteo De Santis. Titolo: "Bond-Analysis techniques in the relativistic four-component framework: the chemical bond in coinage-metal cyanides." Tesi discussa nella sessione di Luglio presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali CCL 2015.
- \* A.A. 2012-2013: tesi di laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dr. Carlo Alberto Gaggioli. Titolo: "On Charge-Shift Bonding: Charge-Displacement Analysis in the Valence Bond framework." Tesi discussa nella sessione di Luglio 2013 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali CCL 2013.
- \* A.A. 2011-2012: tesi di laurea Triennale in Scienze Chimiche di Riccardo Alessandri. Titolo: "Legame alogeno e legame idrogeno in soluzione: ruolo del trasferimento di carica." Tesi discussa nella sessione di Settembre 2012 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali CCL 2012.
- \* A.A. 2010-2011: tesi di laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dr. Enrico Ronca. Titolo: "The role of charge-transfer in the intermolecular interactions of systems containing water". Tesi discussa il 14/07/2011 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali CCL 2011.
- \* A.A. 2010-2011: tesi di laurea Magistrale in Scienze Chimiche del Dr. Demian Marchione. Titolo: "Synthesis and theoretical and experimental NMR study of Au(I) complexes with heterocyclic carbenes". Tesi discussa il 14/07/2011 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali CCL 2011.
- \* A.A. 2008-2009: tesi di laurea Specialistica in Scienze Chimiche del Dr. Nicola Salvi. Titolo: "Experimental and Theoretical study of the chemical bond in Au(I) catalysts". Tesi discussa nella sessione di Luglio 2009 presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia. Rif. verbali CCL 2009.
- \* A.A. 2018-2019: Tirocinante Riccardo Santoni, tirocinante presso ISTM-CNR, iscritto corso di Laurea in Chimica, Università degli studi di Perugia.
- \* A.A. 2017-2018: Diego Sorbelli, tirocinante presso ISTM-CNR, iscritto corso

di Laurea in Chimica, Università degli studi di Perugia.

### **Attività in commissioni di valutazione di referaggio: articoli, progetti**

- \* Dal 2004 svolge attività di valutazione (referaggio) per riviste ISI tra le quali: Journal of American Chemical Society; Organometallics; The Journal of Physical Chemistry; Chemical Physics Letters; Physical Chemistry Chemical Physics.
- \* Agosto 2015: svolge attività di valutatore internazionale per un progetto del programma SASPRO della Slovak Academy of Science. Contratto stipulato il 14/09/2015 tra il Dr. Belpassi e la Slovak Academy of Science, Bratislava. Rappresentante statutario Prof. Pavol Sajgalik. Identification number: 00037869.

### **Attività di ricerca e principali risultati raggiunti**

L'aspetto caratterizzante l'attività di ricerca del Dr. Leonardo Belpassi, che lo pone in una posizione di primo piano a livello internazionale, riguarda lo sviluppo sia teorico che computazionale di metodologie avanzate per lo studio e la caratterizzazione della struttura elettronica di sistemi molecolari contenenti atomi pesanti. Questo settore rappresenta a tutt'oggi una delle sfide più importanti della chimica teorica a livello mondiale e coinvolge settori di applicazione come la catalisi, lo sviluppo di nuovi materiali e di sistemi di interesse tecnologico. Egli ha dato un contributo significativo alla comprensione delle interazioni covalenti e non covalenti nei processi chimici catalizzati da sistemi molecolari contenenti metalli di transizione, in particolare quelli di oro, chiarendone alcuni aspetti meccanicistici in fase omogenea. Ciò che attira particolarmente della catalisi a base di Au(I) è l'abbinamento di versatilità e selettività (chemo-, regio- e/o stereo-), coniugate a grande semplicità operativa, dal momento che i precatalizzatori sono di facile preparazione ed uso. Tali catalizzatori inoltre sono particolarmente promettenti al fine di sviluppare nuove metodologie sintetiche ecocompatibili, grazie alla bassa concentrazione di utilizzo ed al fatto che il principale prodotto di decomposizione di molte reazioni catalitiche risulta essere oro metallico, che può essere separato e recuperato facilmente dai prodotti finali. Inoltre la relativa inerzia chimica di questi catalizzatori rispetto alla presenza di acqua ne ha consentito l'utilizzo in molte reazioni che usano proprio acqua o alcol come solventi. In questo contesto, basandosi su metodi teorici stato dell'arte per la trattazione degli effetti relativistici (necessari per descrivere i sistemi molecolari contenenti oro), ha sviluppato nuove tecniche e modelli di analisi del legame di coordinazione metallo-substrato. I suoi studi hanno permesso per la prima volta di disaccoppiare, in modo semplice e estremamente accurato, le componenti del modello Dewar-Chart-Duncanson (substrato metallo  $\sigma$ -donation,  $S \rightarrow M$ , e substrato metallo  $\pi$ -backdonation,  $S \leftarrow M$ ), diffusamente utilizzato per la descrizione del legame di coordinazione in sistemi organometallici. Sulla base di questa nuova analisi quantitativa è stato possibile dimostrare che le componenti di donazione e retrodonazione del modello del legame DCD possono effettivamente essere disaccoppiate ed osservate sperimentalmente. Innovativi sono anche i suoi studi, condotti in

stretta collaborazione con diversi gruppi sperimentali (Dr. Zuccaccia, UniUD, Prof. Macchioni UniPG, Prof. Busico UniNa), volti a determinare la struttura di coppia ionica nei sistemi catalitici di Au(I) e a razionalizzare la relazione struttura/attività catalitica. Il Dr. Belpassi ha contribuito in modo determinante a chiarire diversi aspetti meccanicistici di questa chimica.

In estrema sintesi i seguenti punti riassumono i principali risultati raggiunti dal Dr. Belpassi: È (co)autore di oltre **120 pubblicazioni** scientifiche sulle più prestigiose riviste internazionali (ISI) di chimica generale, fisica ed inorganica (corresponding author in more than 30). Considerando anche le pubblicazioni non-ISI è **(co)autore di più di 130 lavori**. I suoi lavori hanno un **H-index pari a 36** (fonte WoS). Ha pubblicato **18 lavori su riviste con impact factor (ISI JCR 2015) maggiore di 9**, tra cui (2 ACS Catalysis, 2 Chemical Science, 2 Angewandte Chemie, 1 Energy & Environmental, 1 Accounts of Chemical Research e 4 J. Am. Chem. Soc.). Ha presentato comunicazioni a 30 congressi internazionali. Una delle sue ricerche (Journal of the American Chemical Society 2009, 131, 3170) ha ricevuto un Research Highlights nella prestigiosa rivista Nature Chemistry (doi:10.1038/nchem.164). Nel corso degli ultimi anni, in qualità di Principal Investigator nel progetto FIRB-Futuro in Ricerca 2010 "Nuovi catalizzatori molecolari di Au(I): da know-how a know-why.(AuCat)", ha coordinato direttamente 2 PhD e 2 Post Doc, dando un contributo significativo alla chimica dell'oro e alla comprensione delle sintesi chimiche selettive che vengono mediate da composti catalitici Au(I), chiarendone le basi meccanicistiche, in particolare nella fase omogenea.

Nel corso della sua attività, ha inoltre potuto, con profitto, collaborare con gruppi di ricerca sperimentale di riconosciuta leadership internazionale, in particolare per quanto riguarda la sintesi e caratterizzazione spettroscopica NMR e cinetica di sistemi catalitici di oro (Prof. A. Macchioni dell'Università di Perugia, il Prof. D. Zuccaccia dell'Università, Prof. V. Busico dell'Università Federico II di Napoli) e per quanto riguarda gli esperimenti di scattering inter-molecolare (Prof. F. Pirani, Università di Perugia). Dal punto di vista dello sviluppo metodologico il Dr. Belpassi ha collaborato e collabora con diversi studiosi di fama mondiale, quali il Dr. Harry Quiney (University of Melbourne, Australia), Dr. Filippo De Angeli (CNR), Prof. Lucas Visscher (VU University of Amsterdam, Olanda), Prof. Jeremy Harvey (Chemistry Department, University of Leuven, Belgio), Prof. Remco Havenith (Theoretical Chemistry Center, University of Groningen, Olanda). Il seguente resoconto descrive in dettaglio l'attività scientifica del Dr. Belpassi e vuole evidenziare la sua capacità di determinare autonomamente avanzamenti significativi nell'ambito dell'area strategica oggetto del bando. È diviso per temi di ricerca e fa diretto riferimento alle pubblicazioni scientifiche del candidato elencate a seguire:

**Sviluppo di tecniche avanzate di caratterizzazione e modeling di sistemi molecolari contenenti atomi pesanti.** Il lavoro di ricerca del Dr. Belpassi si è concentrato sullo sviluppo teorico e computazionale di metodi accurati, basati sui principi primi, per lo studio e la caratterizzazione della struttura elettronica in sistemi molecolari contenenti atomi pesanti. Al fine di ottenere modelli accurati per la descrizione della struttura elettronica di questi sistemi, si devono adottare i metodi della meccanica quantistica relativistica basati sull'equazione di Dirac, in modo da includere coerentemente sia effetti cinematici che le interazioni dipendenti dallo spin. La combinazione della teoria di Dirac con quella del funzionale

della densità (DFT) permette di incorporare in maniera efficiente anche la descrizione degli effetti della correlazione elettronica, essenziale per la modellazione di sistemi molecolari a molti elettroni. Questo costituisce l'essenza del metodo Dirac-Kohn-Sham (DKS). Fino a pochi anni fa, l'elevato costo computazionale di un rigoroso approccio relativistico a quattro componenti ("fully relativistic") ha indotto l'adozione e la giustificazione di approssimazioni più o meno pesanti (hamiltoniani modello, metodi a due componenti, pseudo-potenziali ecc.) con i conseguenti svantaggi in termini di accuratezza. Tuttavia, questo stato di cose è rapidamente e sostanzialmente cambiato grazie anche al contributo del Dr. Belpassi. Egli per primo, nel panorama internazionale, ha dimostrato in una serie di lavori che è possibile ridurre enormemente il peso computazionale del metodo DKS, adottando diversi schemi di parallelizzazione (pubbl. [115, 98]), implementando funzionali di scambio e correlazione in modo efficiente (pubbl. [114, 107]) ed introducendo nuovi algoritmi, quali ad esempio quelli basati sul density fitting (pubbl. [113, 107, 90]) e Poisson density fitting ([108]). In questo modo l'approccio DFT relativistico a 4 componenti è stato reso estremamente efficiente e si sono aperte nuove prospettive di sviluppo. Più di recente questo lavoro di ottimizzazione computazionale è stato ulteriormente esteso per superare un ultimo collo di bottiglia, rappresentato dalle enormi quantità di memoria richieste dalle matrici DKS, adottando tecniche di parallelizzazione con distribuzione globale delle matrici [81, 74]. Questo ha aperto la strada a calcoli DKS a 4 componenti con tutti gli elettroni trattati esplicitamente ed estesi sets di base anche per sistemi molecolari contenenti un gran numero di atomi pesanti, come clusters di metalli nobili. Un esempio eclatante è un lavoro recente in cui, grazie alla nuova implementazione, è stato possibile analizzare in modo sistematico l'interazione tra cluster d'oro e diversi atomi super-pesanti (Cn, Fl, E118) al fine di caratterizzarne la natura chimica. Il Dr. Belpassi è stato il principale autore di una review critica riguardo ai possibili ulteriori sviluppi di questo approccio [90]. Applicazioni di grande rilevanza sono state condotte dal Dr. Belpassi nel campo della spettroscopia ad alta precisione. Ad esempio, la determinazione accurata del momento di quadrupolo nucleare (NQM) di  $^{197}\text{Au}$  (pubbl. [118], [111] e [110]). La conoscenza accurata del NQM è di fondamentale importanza per la fisica nucleare e per la spettroscopia rotazionale. Per la prima volta in questa occasione, inoltre, è stato possibile includere, nella trattazione gli effetti relativistici sull'interazione elettrone-elettrone, l'interazione magnetica (contributo di Gaunt) e i termini di ritardo (contributo di Breit). Il valore ottenuto per il NQM di  $^{197}\text{Au}$  è stato di fatto accolto dalla comunità scientifica come nuovo valore di riferimento. Di recente il metodo DKS è stato applicato con successo per l'analisi dettagliata degli effetti relativistici non-scalari (spin-orbit coupling) in diversi meccanismi di reazione mediate da catalizzatori molecolari contenenti atomi pesanti [77, 54]. Egli è attualmente lo sviluppatore principale del programma di calcolo di chimica quantistica relativistica BERTHA [90, ?].

**Sviluppo di metodi per lo studio e caratterizzazione del legame chimico. Applicazioni a sistemi catalitici di oro(I).** In anni recenti si è viepiù venuta rivelando la ricca chimica dell'oro e l'importanza di questo elemento per scopi di tecnologia avanzata, sia in elettronica, sia per nuovi materiali e in catalisi eterogenea ed omogenea. La ricerca scientifica in questo campo ha dunque avuto una accelerazione senza uguali, sia per quantità che qualità, ma per lo più limitata ad esperimenti, sintesi ed applicazioni. L'origine e la natura delle interazioni e dei legami chimici che coinvolgono l'oro, per lungo tempo

ritenuto il prototipo della nobiltà ed inerzia chimica, sfuggono ancora in gran parte ad una comprensione teorica chiara, sistematica e generalizzabile. Le indagini computazionali del Dr. Belpassi si sono occupate attivamente di questa problematica ed hanno prodotto contributi estremamente significativi. *Legame chimico tra complessi di Au(I) e Gas nobili*. Un importante esempio riguarda lo studio della classe di composti contenenti oro, o altri metalli nobili, legati ad un gas nobile. Questi composti sono di particolare interesse e notevoli sforzi sono stati diretti alla loro sintesi e caratterizzazione proprio perché contengono elementi di entrambi i gruppi ritenuti maggiormente inerti. Lo studio teorico sulla base di metodologie stato dell'arte, per quanto riguarda sia la trattazione degli effetti relativistici che della correlazione elettronica, ha permesso la razionalizzazione delle proprietà fondamentali del legame chimico di questi sistemi. La pubblicazione prodotta come risultato è uno dei suoi lavori più citati [109] (ad oggi oltre 200 citazioni).

*Interazioni covalenti in complessi catalitici di Au(I). Modello Dewar-Chatt-Duncanson e osservabili sperimentali*. Di attualissimo interesse è la scoperta che composti del tipo  $[L-Au(I)-S]^+X^-$  (dove L è un legante neutro, tipicamente una fosfina o un carbene eterociclico e  $X^-$  è un anione poco coordinante) possono con grande efficacia attivare molti substrati insaturi (S) poco reattivi verso l'addizione nucleofila. Questi catalizzatori abbinano di versatilità e selettività (chemo-, regio- e/o stereo-), coniugate a grande semplicità operativa. Essi sono stati definiti come i catalizzatori più "ecosostenibili" sia per la bassa concentrazione a cui lavorano sia perché il principale prodotto di decomposizione di molte reazioni catalitiche risulta essere oro metallico che può essere separato e recuperato facilmente dai prodotti finali. Inoltre la relativa inerzia chimica di questi catalizzatori rispetto alla presenza di acqua ne ha consentito l'utilizzo in molte reazioni che usano proprio acqua o alcol come solventi. Il Dr. Belpassi ha sviluppato un metodo semplice ma estremamente potente per lo studio proprio del legame metallo-substrato in questi complessi (Charge-Displacement-Analysis) [109, 100, 66, 51]. L'approccio, basato su osservabili fondamentali, quali la variazione della densità elettronica dovuta alla formazione del legame chimico, ha permesso di definire in modo non ambiguo, per la prima volta, le componenti di donazione e retrodonazione del modello Dewar-Chatt-Duncanson (uno dei modelli di legame più utilizzati nella chimica di coordinazione) del legame Au-C e di studiarne in modo quantitativo la relativa importanza rispetto alla natura del legante [100, 79, 97]. In particolare, nel suo lavoro (Disentanglement of Donation and Back-Donation Effects on Experimental Observables: A Case Study of Gold-Ethyne Complexes *Angewandte Chemie, Int. Ed.* 2013, 52, 11599-11602.[82]) è stato possibile dimostrare per la prima volta in modo incontrovertibile che donazione e retrodonazione possono effettivamente essere estratte da osservabili sperimentali. In una serie di lavori a seguire ha poi dimostrato la possibilità di avere correlazioni dirette tra le componenti del legame del modello Dewar-Chatt-Duncanson (DCD) ( $\sigma$ -donation e  $\pi$ -backdonation) e specifiche osservabili sperimentali. Ad esempio: i) la variazione nella frequenza di stretching del CO coordinato a dei frammenti metallici della formula  $[(L)_nM(CO)]$  sono direttamente relazionati alle proprietà  $\pi$  acide/basiche del frammento metallico [53], ii) il potere di donazione di un legante L può essere effettivamente misurato sulla base di misure NMR atte a determinare la barriera rotazionale del legame C-N di un carbene aciclico (NAC) in complessi di formula  $[(L)Au(I)(NAC)]$  [62]; iii) un altro metodo per valutare la capacità di donazione dei leganti è basato sulla misura della riarrangiamento geometrico dell'anello ciclopropilico (S) in complessi  $[(L)Au(S)]^{n+}$  complexes [71]. Questi studi hanno dimostrato come sia effettiva-

mente possibile avere informazioni quantitative sull'effetto elettronico del legante nei sistemi catalitici di Au(I) e rappresentano il primo passo di un ligand design efficace. Di recente la Charge Displacement Analysis è stata ulteriormente sviluppata dal Dr. Belpassi, estendendola alla trattazione di sistemi senza simmetria molecolare. Questo apre le porte alla possibilità di analizzare il legame metallo-substrato lungo il cammino di reazione e quindi di analizzare con estremo dettaglio l'effetto elettronico del legante, un avanzamento cruciale rispetto al 'sogno' di un ligand design più razionale basato su principi primi.[51, 66]

*Interazioni non covalenti in complessi catalitici di Au(I).* Il Dr. Belpassi ha contribuito in modo sostanziale alla prima caratterizzazione della struttura interionica di complessi [L-Au-S]X in soluzione. Il principale risultato dello studio è stato quello di aver dimostrato che il controione non si avvicina al centro metallico (che ha una carica parziale molto bassa nonostante il formale stato di ossidazione +1) ma si posiziona preferenzialmente in zone diverse nei due complessi, in particolare a distanze molto diverse dal sito reattivo. I risultati sono stati riportati in una pubblicazione di particolare rilievo (pubbl. [106]) e sono stati anche evidenziati nella sezione "Research Highlights" della prestigiosa rivista *Nature Chemistry* (DOI: 10.1038/nchem.164). Sulla base di questo lavoro pionieristico, il Dr. Belpassi ha condotto, in stretta collaborazione con i gruppi sperimentali del Prof. Zuccaccia e del Prof. Macchioni, una serie di studi successivi in cui è stato possibile dimostrare che la posizione preferenziale del controione [100, 97, 87, 86, 85, 61], nonché la sua influenza sulla reattività [64, 76, 59, 55], è modulabile razionalmente attraverso un'opportuna scelta dei leganti ancillari. Questo studio ha aperto nuove prospettive per il controllo delle proprietà e dell'attività di questa classe di catalizzatori con sorprendenti risultati nel contesto della chimica sostenibile. Il Dr. Belpassi ha contribuito in modo sostanziale alla razionalizzazione dell'effetto dell'anione che ha reso possibile lo sviluppo di un protocollo efficiente per condurre la reazione di idratazione degli alchini catalizzata da Au(I) in assenza di argento, di solvente o additivi rendendo il processo altamente ecosostenibile. [55]

**Studio della natura del legame in complessi molecolari debolmente legati contenenti acqua e molecole alogenate.** Le interazioni intermolecolari non covalenti che coinvolgono la molecola d'acqua o molecole alogenate hanno un ruolo cruciale nella chimica e biochimica, sia in natura che in laboratorio (basti pensare alla peculiarità del legame idrogeno/alogeno), ma non sono ancora ben comprese e modellate. Il Dr. Belpassi, in questo contesto, ha studiato in dettaglio diversi sistemi che coinvolgono legame ad idrogeno [104, 96, 93, 92, 89, 83, 78, 70, 69] e legame alogeno [58, 65, 68, 91], dimostrando in modo non ambiguo, per la prima volta, che un piccolo ma significativo trasferimento di carica è presente in questi complessi (prima ritenuti puramente governati da forze dispersive). Il ruolo del CT risulta essere cruciale nel determinare la geometria di equilibrio degli addotti ed i dettagli dell'anisotropia dell'interazione. I risultati hanno spiegato e razionalizzato in maniera quantitativa le sorprendenti osservazioni sperimentali (ottenute in regime di singola collisione) ad altissima risoluzione della sezione d'urto di scattering. Un risultato pionieristico del Dr. Belpassi è quello di aver formulato un modello in grado di associare una energia alla componente di trasferimento di carica sulla base di osservabili sperimentali. Questo risultato è stato pubblicato sulla rivista *Accounts of Chemical Research* [88] La scoperta ha aperto nuove prospettive per una modellistica più realistica di questi sistemi.

**Applicazioni a sistemi complessi di interesse tecnologico.** Le metodologie di anal-

isi dell'interazione sono state applicata con grande successo anche in diversi contesti, quali la caratterizzazione degli stati elettronici eccitati in sistemi molecolari [72, 73] o sistemi di grande interesse tecnologico (dye-sensitized solar cells). In questo contesto ha avuto particolare rilevanza uno studio in cui è stato possibile razionalizzare come molecole di sensibilizzatore assorbite su un semiconduttore (in questo caso nanoparticelle di  $\text{TiO}_2$ ) possano influenzare la banda di conduzione del semiconduttore nelle dye-sensitized solar cells. Il Dr. Belpassi ha sviluppato il modello che ha permesso di disaccoppiare l'effetto dovuto al trasferimento di carica da quello dovuto al campo elettrico generato dal sensibilizzatore. Questo studio ha avuto particolare rilevanza nella comunità scientifica e risulta essere uno dei più citati[84] (ad oggi altre 240 citazioni).

### Comunicazioni orali a congressi

- \* "Four-component Dirac-Kohn-Sham calculations: State of the Art and computational advancements (part I)" 31 marzo 2022, Keynote lecture. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO. Invito ricevuto per e-mail dall'organizzatore: Prof. Valerio D'Elia. Vidyasirimedhi Institute of Science and Technology, Rayong, Thailand.
- \* "Four-component Dirac-Kohn-Sham calculations" 30 giugno 2021, Shoolini Science Web Series. Keynote lecture. Shoolini University, India. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO. Invito ricevuto per e-mail dall'organizzatore: Dr. Anirban Saha, Assistant Professor, School of Physics and Materials Science, Shoolini University, Himachal Pradesh - 173229, India. email: anirbansaha@shooliniuniversity.co
- \* "Relativistic Quantum Chemistry (a partial view)" 21 Giugno 2019, School of Chemistry, Edinburg, UK. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO. Invito per e-mail ricevuto per e-mail dal Dr. Adam Kirrander, School of Chemistry, Edinburg, UK (Adam.Kirrander@ed.ac.uk).
- \* "Bond analysis in a relativistic framework: Charge-Displacement analysis via natural spinors for the chemical valence" 15 Novembre 2017, Institut de Química Computacional i Catalisi, Girona, Spagna. LEZIONE SU INVITO. Invito ricevuto per e-mail dal Prof. Marcel Swart. Rif. Locandina disponibile a sito: [https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli\\_concorso/src/master/talkGirona2017.pdf](https://bitbucket.org/lbelpassi/titoli_concorso/src/master/talkGirona2017.pdf)
- \* "Bond analysis in the four-component relativistic framework: Charge-Displacement analysis via natural spinors for the chemical valence" 2-6 settembre 2017, 12th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (REHE-2017), Marburg, Germania. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO (invito per e-mail ricevuto il 23 dicembre 2016 dall'organizzatore Prof. Robert Berger. Si veda anche il sito web della conferenza in cui si presenta la lista degli invited speakers: <https://www.online.uni-marburg.de/rehe2017/spe>
- \* "Charge-displacement analysis: a simple tool to reveal charge transfer effects throughout the whole periodic table" 27 agosto-1 settembre 2017, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Monaco, Germania.

- \* "Relativistic quantum chemistry involving heavy atoms", 27-28 aprile 2017, convegno "The quantum world of molecules: from orbitals to spin networks" organizzato dall'Accademia Nazionale dei Lincei, Roma, Italia. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO (Lettera invito data 12 aprile 2017 e protocollata Accademia Nazionale dei Lincei, Convegni-PP-Prot. n. 221/2017)
- \* "Dewar-Chatt-Duncanson model and experimental observables: Case of Au(I) complexes", 27-30 luglio 2015, 7th International Gold Conference, Cardiff Catalysis Institute, Cardiff, UK.
- \* "Donation and back donation effects on experimental observables", 14-16 dicembre 2015, III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Com. Organizzatore E. Bodo, M. D'Abramo e M. Aschi. Roma, Italia.
- \* "Revealing Charge Transfer in Gas-Phase: Systems with Weak Halogen and Hydrogen Bonds", 18-22 giugno 2014, ISXB1 1st International Symposium on Halogen Bonding, 18-22 giugno 2014, Porto Cesareo, Italia. Book of abstracts (ISBN: 97888-6493-025-1).
- \* "On the Dewar-Chatt-Duncanson model for Au(I) complexes with Nitrogen Heterocyclic Carbenes (NHC)", 9-13 settembre 2013, 15th International Conference on Density Functional Theory and its Applications (DFT2013), Durham, UK.
- \* "Recent advances and perspectives in 4-component Dirac-Kohn-Sham calculations", 20-22 febbraio 2013, II Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Padova, Italia.
- \* "On the Dewar-Chatt-Duncanson model for Au(I) complexes with Nitrogen Heterocyclic Carbenes (NHC)", 5-8 giugno 2012, X CO.G.I.C.O Congresso del Gruppo Interdivisionale di Chimica Organometallica della Società Chimica Italiana, Padova, Italia.
- \* "Charge Displacement Analysis of Weakly Bound Intermolecular Complexes", 18-19 settembre 2011, Workshop Halogen vs. Hydrogen Intermolecular Interactions at Work tenutosi presso Politecnico di Milano e organizzato dal Prof. Resnati, Milano, Italia. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO.
- \* "On the Dewar-Chatt-Duncanson model for catalytic gold(I) complexes", 13-16 settembre 2010, XXXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, Trieste, Italia.
- \* "Chemical Characterization on Super-Heavy Elements on Gold Clusters by 4-Component full relativistic DFT", 1-4 settembre 2009, PARCO2009 International conference on parallel computing, Lione, Francia. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO.
- \* "Making very-large-scale all-electron 4-component Dirac-Kohn Sham calculations possible", 1-4 maggio 2008, CERC3 Meeting, Perugia, Italia. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO.
- \* "Electron density Fitting in the Computational program BERTHA", agosto 2007, Dirac Meeting, Odense, Danimarca. CONTRIBUTO ORALE SU INVITO.

VITO

- \* "The nuclear electric quadrupole moment of gold", 12-15 giugno 2007, VI Convegno Nazionale INSTM, Perugia, Italia.
- \* "Electron density fitting for the Coulomb problem in relativistic density functional theory", 7-12 marzo 2006, Very Heavy Metals, Aubrac, Francia. Atti congresso.
- \* "Computational strategies based on electron density fitting in relativistic density functional theory", 30 ottobre - 1 novembre 2006, ICCMSE 2006 Sciences and Engineering, Chania, Creta, Grecia. Atti congresso

### Pubblicazioni

- [1] De Santis M, Sorbelli D, Vallet V, Gomes ASP, Storch L, and Belpassi L, *Frozen-Density Embedding for Including Environmental Effects in the Dirac-Kohn-Sham Theory: An Implementation Based on Density Fitting and Prototyping Techniques*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2022**; 10.1021/acs.jctc.2c00499 EA SEP 2022, Articolo in rivista.
- [2] Sorbelli D, Belpassi L, and Belanzoni P, *Mechanistic Study of Alkyne Insertion into Cu-Al and Au-Al Bonds: A Paradigm Shift for Coinage Metal Chemistry*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2022**, 61, 21095-21106; 10.1021/acs.inorgchem.2c03713 EA DEC 2022, Articolo in rivista.
- [3] Leach IF, Sorbelli D, Belpassi L, Belanzoni P, Havenith RWA, and Klein JEMN, *How reduced are nucleophilic gold complexes?*, *DALTON TRANSACTIONS*, **2022**; 10.1039/d2dt01694j EA JUL 2022, Articolo in rivista.
- [4] Sorbelli D, Belpassi L, and Belanzoni P, *What Singles out Aluminyl Anions? A Comparative Computational Study of the Carbon Dioxide Insertion Reaction in Gold-Aluminyl, -Gallyl, and -Indyl Complexes*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2022**, page 13; 10.1021/acs.inorgchem.1c03579 EA JAN 2022, Articolo in rivista.
- [5] Sorbelli D, Belanzoni P, Belpassi L, Lee JW, and Ciancaleoni G, *An ETS-NOCV-based computational strategies for the characterization of concerted transition states involving CO<sub>2</sub>*, *JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY*, **2022**, page 11; 10.1002/jcc.26829 EA FEB 2022, Articolo in rivista.
- [6] Sorbelli D, Rossi E, Havenith RWA, Klein JEMN, Belpassi L, and Belanzoni P, *Gold-Aluminyl and Gold-Diarylboryl Complexes: Bonding and Reactivity with Carbon Dioxide*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2022**, 61, 7327-7337; 10.1021/acs.inorgchem.2c00174, Articolo in rivista.
- [7] Sorbelli D, Belpassi L, and Belanzoni P, *Unraveling differences in aluminyl and carbene coordination chemistry: bonding in gold complexes and reactivity with carbon dioxide*, *CHEMICAL SCIENCE*, **2022**, 13, 4623-4634; 10.1039/d2sc00630h EA MAR 2022, Articolo in rivista.

- [8] Sorbelli D, Segato J, Del Zotto A, Belpassi L, Zuccaccia D, and Belanzoni P, *The mechanism of the gold(i)-catalyzed Meyer-Schuster rearrangement of 1-phenyl-2-propyn-1-ol via 4-endo-dig cyclization*, *DALTON TRANSACTIONS*, **2021**, 50, 5154–5160; 10.1039/d1dt00080b, Articolo in rivista.
- [9] Nunzi F, Cesario D, Tarantelli F, and Belpassi L, *Halogen bond interaction: Role of hybridization and induction*, *CHEMICAL PHYSICS LETTERS*, **2021**, 771, 8; 10.1016/j.cplett.2021.138522 EA MAR 2021, Articolo in rivista.
- [10] Leach IF, Belpassi L, Belanzoni P, Havenith RWA, and Klein JEMN, *Efficient Computation of Geometries for Gold Complexes*, *CHEMPHYSICHEM*, **2021**, 22, 1262–1268; 10.1002/cphc.202001052 EA MAY 2021, Articolo in rivista.
- [11] Sorbelli D, Belpassi L, and Belanzoni P, *Reactivity of a Gold-Aluminyll Complex with Carbon Dioxide: A Nucleophilic Gold?*, *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, **2021**, 143, 14433–14437; 10.1021/jacs.1c06728 EA SEP 2021, Articolo in rivista.
- [12] Sabatelli F, Segato J, Belpassi L, Del Zotto A, Zuccaccia D, and Belanzoni P, *Monitoring of the Pre-Equilibrium Step in the Alkyne Hydration Reaction Catalyzed by Au(III) Complexes: A Computational Study Based on Experimental Evidences*, *MOLECULES*, **2021**, 26, 13; 10.3390/molecules26092445, Articolo in rivista.
- [13] Segato J, Baratta W, Belanzoni P, Belpassi L, Del Zotto A, and Zuccaccia D, *Experimental and theoretical investigation of the cycloisomerization of N-propargylcarboxamide catalyzed by NHC-Au-X in green solvents*, *INORGANICA CHIMICA ACTA*, **2021**, 522, 6; 10.1016/j.ica.2021.120372 EA APR 2021, Articolo in rivista.
- [14] Sorbelli D, Belanzoni P, and Belpassi L, *Tuning the Gold(I)-Carbon sigma Bond in Gold-Alkynyl Complexes through Structural Modifications of the NHC Ancillary Ligand: Effect on Spectroscopic Observables and Reactivity*, *EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY*, **2021**, 2021, 2401–2416; 10.1002/ejic.202100260 EA MAY 2021, Articolo in rivista.
- [15] Belpassi L, De Santis Matteo, Quiney M, Tarantelli Francesco, and Storchi Lorian, *BERTHA: Implementation of a four-component DiracKohnSham relativistic framework*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, **2020**, 152; 10.1063/5.0002831, Articolo in rivista.
- [16] Sorbelli Diego, Belanzoni Paola, Saue Trond, and Belpassi L, *Ground and excited electronic states of AuH 2 via detachment energies on AuH 2 using state-of-the-art relativistic calculations*, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, **2020**, 22, 26742–26752; 10.1039/D0CP05204C, Articolo in rivista.
- [17] De Santis Matteo, Storchi Lorian, Belpassi L, Quiney M, and Tarantelli Francesco, *PyBERTHART: A Relativistic Real-Time Four-Component TDDFT Implementation Using Prototyping Techniques Based on Python*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2020**, 16, 2410–2429; 10.1021/acs.jctc.0c00053, Articolo in rivista.

- [18] Ciancaleoni G and Belpassi L, *Disentanglement of orthogonal hydrogen and halogen bonds via natural orbital for chemical valence*, *JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY*, **2020**, *41*; 10.1002/jcc.26165, Articolo in rivista.
- [19] De Santis Matteo, Belpassi L, Jacob R, Severo Pereira Gomes Andr, Tarantelli Francesco, Visscher Lucas, and Storchi Lorian, *Environmental Effects with Frozen-Density Embedding in Real-Time Time-Dependent Density Functional Theory Using Localized Basis Functions*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2020**, *16*, 5695–5711; 10.1021/acs.jctc.0c00603, Articolo in rivista.
- [20] Sorbelli Diego, De Santis Matteo, Belanzoni Paola, and Belpassi L, *Spectroscopic/Bond Property Relationship in Group 11 Dihydrides via Relativistic Four-Component Methods*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, **2020**, *124*, 10565–10579; 10.1021/acs.jpca.0c09043, Articolo in rivista.
- [21] Segato Jacopo, Del Zotto Alessandro, Belpassi L, Belanzoni Paola, and Zuccaccia Daniele, *Hydration of alkynes catalyzed by  $[Au(X)(L)(ppy)]X$  in the green solvent -valerolactone under acid-free conditions*, *CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY*, **2020**, *10*, 7757–7767; 10.1039/D0CY01343A, Articolo in rivista.
- [22] Izquierdo A, Tarantelli F, Broer R, Bistoni G, Belpassi L, and Havenith A, *Orbital Decomposition of the Carbon Chemical Shielding Tensor in Gold(I) N-Heterocyclic Carbene Complexes*, *EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY*, **2020**, *2020*; 10.1002/ejic.201901115, Articolo in rivista.
- [23] Nunzi F, Pannacci G, Tarantelli F, Belpassi L, Cappelletti D, Falcinelli S, and Pirani F, *Leading interaction components in the structure and reactivity of noble gases compounds*, *MOLECULES*, **2020**, *25*; 10.3390/molecules25102367, Articolo in rivista.
- [24] D'Amore L, Belpassi L, Klein JEMN, and Swart M, *Spin-resolved charge displacement analysis as an intuitive tool for the evaluation of cPCET and HAT scenarios*, *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, **2020**, *56*, 12146–12149; 10.1039/d0cc04995f, Articolo in rivista.
- [25] Germani R., Anastasio P., Chiodini M., Del Giacco T., Tiecco M., and Belpassi L., *Fluorescent signal transduction in a self-assembled  $Hg^{2+}$  chemosensor tuned by various interactions in micellar aqueous environment*, *JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY. A, CHEMISTRY*, **2020**, *389*, 112276; 10.1016/j.jphotochem.2019.112276, Articolo in rivista.
- [26] Ciancaleoni G., Nunzi F., and Belpassi L., *Charge displacement analysis A tool to theoretically characterize the charge transfer contribution of halogen bonds*, *MOLECULES*, **2020**, *25*, 300; 10.3390/molecules25020300, Articolo in rivista.
- [27] Germani R., Purgatorio F., Anastasio P., Belpassi L., Elisei F., Tiecco M., and Del Giacco T., *Turn-off and -on fluorescence switching of a self-assembled*

- sensor for mercury(II) induced by anionic micelles, *DYES AND PIGMENTS*, **2020**, 173, 107959; 10.1016/j.dyepig.2019.107959, Articolo in rivista.
- [28] Elisa Rossi, Matteo De Santis, Diego Sorbelli, Lorian Storchi, Leonardo Belpassi, and Paola Belanzoni, *Spinorbit coupling is the key to unraveling intriguing features of the halogen bond involving astatine*, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, **2020**, 22, 1897–1910; 10.1039/c9cp06293a, Articolo in rivista.
- [29] Damiano Ricciarelli, Leonardo Belpassi, Jeremy N. Harvey, and Paola Belanzoni, *Spinforbidden reactivity of transition metaloxo species: exploring the potential energy surfaces*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2020**, 26, 3080–3089; 10.1002/chem.201904314, Articolo in rivista.
- [30] Luca Gregori, Sorbelli Diego, Leonardo Belpassi, Francesco Tarantelli, and Paola Belanzoni, *Alkyne Activation with Gold(III) Complexes: A Quantitative Assessment of the Ligand Effect by Charge-Displacement Analysis*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2019**, 58, 3115–3129; 10.1021/acs.inorgchem.8b03172, Articolo in rivista.
- [31] Diego Sorbelli, Laura NunesdosSantosComprido, Gerald Knizia, A. Stephen K. Hashmi, Leonardo Belpassi, Paola Belanzoni, and Johannes E. M. N. Klein, *Cationic Gold(I) Diarylallenylidene Complexes: Bonding Features and Ligand Effects*, *CHEMPHYSICHEM*, **2019**, 20, 1671–1679; 10.1002/cphc.201900411, Articolo in rivista.
- [32] Pirani Fernando, Cappelletti David, Falcinelli Stefano, Cesario Diego, Nunzi Francesca, Belpassi Leonardo, and Tarantelli Francesco, *Selective Emergence of the Halogen Bond in Ground and Excited States of Noble-Gas-Chlorine Systems*, *ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION*, **2019**, 58, 4195–4199; 10.1002/anie.201812889, Articolo in rivista.
- [33] Nunzi Francesca, Cesario Diego, Belpassi Leonardo, Tarantelli Francesco, Roncaratti Luiz F., Falcinelli Stefano, Cappelletti David, and Pirani Fernando, *Insight into the halogen-bond nature of noble gas-chlorine systems by molecular beam scattering experiments, ab initio calculations and charge displacement analysis*, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, **2019**, 21, 7330–7340; 10.1039/C9CP00300B, Articolo in rivista.
- [34] RICCIARELLI DAMIANO, Quan Manh Phung, Leonardo Belpassi, Jeremy N. Harvey, and Paola Belanzoni, *Understanding the Reactivity of Mn-Oxo Porphyrins for Substrate Hydroxylation: Theoretical Predictions and Experimental Evidence Reconciled*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2019**, 58, 7345–7356; 10.1021/acs.inorgchem.9b00476, Articolo in rivista.
- [35] Diego Ccsario, Francesca Nunzi, Leonardo Belpassi, Fernando Pirani, Enrico Ronca, and Francesco Tarantelli, *Chemical Bond Mechanism for Helium Revealed by Electronic Excitation*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, **2019**, 123, 6572–6577; 10.1021/acs.jpca.9b05351, Articolo in rivista.

- [36] BORGHESI COSTANZA, Eros Radicchi, Leonardo Belpassi, Daniele Meggiolaro, Filippo De Angelis, and Francesca Nunzi, *The nature of the lead-iodine bond in PbI<sub>2</sub>: A case study for the modelling of lead halide perovskites*, *COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY*, **2019**, 1164, 112558; 10.1016/j.comptc.2019.112558, Articolo in rivista.
- [37] Diego Sorbelli, Leonardo Belpassi, Francesco Tarantelli, and Paola Belanzoni, *Ligand Effect on Bonding in Gold(III) Carbonyl Complexes*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2018**, 57, 6161–6175; 10.1021/acs.inorgchem.8b00765, Articolo in rivista.
- [38] De Santis Matteo, Belpassi Leonardo, Tarantelli Francesco, and Storchi Lorian, *Relativistic quantum chemistry involving heavy atoms*, *RENDICONTI LINCEI. SCIENZE FISICHE E NATURALI*, **2018**, 29, 209–217; 10.1007/s12210-018-0706-7, Articolo in rivista.
- [39] De Santis M, Rampino S, Quiney H M, Belpassi L, and Storchi L, *Charge-displacement analysis via natural orbitals for chemical valence in the four-component relativistic framework*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2018**, 14, 1286–1296; 10.1021/acs.jctc.7b01077, Articolo in rivista.
- [40] Gaggioli Carlo Alberto, Belpassi Leonardo, Tarantelli Francesco, Harvey Jeremy N., and Belanzoni Paola, *Spin-Forbidden Reactions: Adiabatic Transition States Using Spin-Orbit Coupled Density Functional Theory*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2018**, 24, 5006–5015; 10.1002/chem.201704608, Articolo in rivista.
- [41] Mattia Gatto, Walter Baratta, Paola Belanzoni, Leonardo Belpassi, Alessandro Del Zotto, Francesco Tarantelli, and Daniele Zuccaccia, *Hydration and alkylation of alkynes catalyzed by NHCAuOTf*, *GREEN CHEMISTRY*, **2018**, 20, 2125–2134; 10.1039/c8gc00508g, Articolo in rivista.
- [42] De Santis M, Rampino S, Quiney H M, Belpassi L, and Storchi L, *Charge-displacement analysis via natural orbitals for chemical valence in the four-component relativistic framework*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2018**, 14, 1286–1296; 10.1021/acs.jctc.7b01077, Articolo in rivista.
- [43] Nunzi F, Cesario D, Pirani F, Belpassi L, Frenking G, Grandinetti F, and Tarantelli F, *Helium Accepts Back-Donation In Highly Polar Complexes: New Insights into the Weak Chemical Bond*, *THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS*, **2017**, 8, 3334–3340; 10.1021/acs.jpcllett.7b01320, Articolo in rivista.
- [44] Gaggioli Carlo Alberto, Belpassi Leonardo, Tarantelli Francesco, Harvey Jeremy N., and Belanzoni Paola, *The ligand effect on the oxidative addition of dioxygen to gold(I)hydride complexes*, *DALTON TRANSACTIONS*, **2017**, 46, 11679–11690; 10.1039/c7dt02170d, Articolo in rivista.
- [45] Gaggioli Carlo Alberto, Bistoni Giovanni, Ciancaleoni Gianluca, Tarantelli Francesco, Belpassi Leonardo, and Belanzoni Paola, *Modulating the Bond-*

- ing Properties of N-Heterocyclic Carbenes (NHCs): A Systematic Charge-Displacement Analysis, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2017**, *23*, 7558–7569; DOI: 10.1002/chem.201700638, Articolo in rivista.
- [46] D'Amore Lorenzo, Ciancaleoni Gianluca, Belpassi Leonardo, Tarantelli Francesco, Zuccaccia Daniele, and Belanzoni Paola, *Unraveling the Anion/Ligand Interplay in the Reaction Mechanism of Gold(I)-Catalyzed Alkoxylation of Alkynes*, *ORGANOMETALLICS*, **2017**, *36*, 2364–2376; 10.1021/acs.organomet.7b00377, Articolo in rivista.
- [47] Gaggioli Carlo Alberto, Belpassi Leonardo, Tarantelli Francesco, and Belanzoni Paola, *The gold(III)CO bond: a missing piece in the gold carbonyl complex landscape*, *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, **2017**, *53*, 1603–1606; 10.1039/c6cc09879g, Articolo in rivista.
- [48] Marchione Demian, Izquierdo Maria A., Bistoni Giovanni, Havenith Remco W. A., Macchioni Alceo, Zuccaccia Daniele, Tarantelli Francesco, and Belpassi Leonardo,  *$^{13}\text{C}$  NMR Spectroscopy of N-Heterocyclic Carbenes Can Selectively Probe Donation in Gold(I) Complexes*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2017**, *23*, 2722–2728; 10.1002/chem.201605502, Articolo in rivista.
- [49] Ciancaleoni, G., Belpassi L., Marchetti, and F., *Back-Donation in High-Valent d0Metal Complexes: Does It Exist? the Case of NbV*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2017**, *56*, 11266–11274; 10.1021/acs.inorgchem.7b01635, Articolo in rivista.
- [50] Gaggioli Carlo Alberto, Belpassi Leonardo, Tarantelli Francesco, Harvey Jeremy N., and Belanzoni Paola, *Spin-Forbidden Reactions: Adiabatic Transition States Using Spin-Orbit Coupled Density Functional Theory*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2017**; 10.1002/chem.201704608, Articolo in rivista.
- [51] Bistoni Giovanni, Belpassi L., and Tarantelli Francesco, *Advances in Charge Displacement Analysis*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2016**, *12*, 1236–1244; DOI:10.1021/acs.jctc.5b01166.
- [52] Trinchillo Marina, Belanzoni Paola, Belpassi L., Biasiolo Luca, Busico Vincenzo, D'Amora Angela, D'Amore Lorenzo, Del Zotto Alessandro, Tarantelli Francesco, Tuzi Angela, and Zuccaccia Daniele, *Extensive Experimental and Computational Study of Counterion Effect in the Reaction Mechanism of NHC-Gold(I)-Catalyzed Alkoxylation of Alkynes*, *ORGANOMETALLICS*, **2016**, *35*, 641–654; DOI:10.1021/acs.organomet.5b00925.
- [53] Bistoni G., Rampino S., Scafuri N., Ciancaleoni G., Zuccaccia D., Belpassi L., and Tarantelli F., *How  $\pi$  back-donation quantitatively controls the CO stretching response in classical and non-classical metal carbonyl complexes*, *CHEMICAL SCIENCE*, **2016**, *7*, 1174–1184; DOI:10.1039/c5sc02971f.
- [54] Gaggioli Carlo Alberto, Belpassi L., Tarantelli Francesco, Zuccaccia Daniele, Harvey Jeremy N., and Belanzoni Paola, *Dioxygen insertion into the gold(I)-hydride bond: spin orbit coupling effects in the spotlight for oxidative addition*, *CHEMICAL SCIENCE*, **2016**, *7*, 7034–7039; DOI:10.1039/c6sc02161a.

- [55] Gatto Mattia, Belanzoni Paola, Belpassi L., Biasiolo Luca, Del Zotto Alessandro, Tarantelli Francesco, and Zuccaccia Daniele, *Solvent-, Silver-, and Acid-Free NHC-Au-X Catalyzed Hydration of Alkynes. The Pivotal Role of the Counterion*, *ACS CATALYSIS*, **2016**, *6*, 7363–7376; DOI:10.1021/acscatal.6b01626.
- [56] Gaggioli Carlo Alberto, Ciancaleoni Gianluca, Zuccaccia Daniele, Bistoni Giovanni, Belpassi L., Tarantelli Francesco, and Belanzoni Paola, *Strong electron-donating ligands accelerate the protodeauration step in gold(I)-catalyzed reactions: a quantitative understanding of the ligand effect*, *ORGANOMETALLICS*, **2016**, *35*, 2275–2285; DOI:10.1021/acs.organomet.6b00346.
- [57] Bistoni Giovanni, Belanzoni Paola, Belpassi L., and Tarantelli Francesco,  *$\pi$  Activation of Alkynes in Homogeneous and Heterogeneous Gold Catalysis*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A*, **2016**, *120*, 5239–5247; DOI:10.1021/acs.jpca.6b01037.
- [58] Cappelletti David, Aquilanti Vincenzo, Bartocci Alessio, Nunzi Francesca, Tarantelli Francesco, Belpassi L., and Pirani Fernando, *Interaction of  $O_2$  with  $CH_4$ ,  $CF_4$ , and  $CCl_4$  by Molecular Beam Scattering Experiments and Theoretical Calculations*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A*, **2016**, *120*, 5197–5207; DOI:10.1021/acs.jpca.6b00948.
- [59] Biasiolo Luca, Belpassi L., Gaggioli Carlo Alberto, Macchioni Alceo, Tarantelli Francesco, Ciancaleoni Gianluca, and Zuccaccia Daniele, *Cyclization of 2-Alkynyldimethylaniline on Gold(I) Cationic and Neutral Complexes*, *ORGANOMETALLICS*, **2016**, *35*, 595–604; DOI:10.1021/acs.organomet.5b01030.
- [60] Sergio Rampino, Lorian Storch, and Leonardo Belpassi, *Goldsuperheavy-element interaction in diatomics and cluster adducts: A combined four-component Dirac-Kohn-Sham/charge-displacement study*, *The Journal of Chemical Physics*, **2015**, *143*(2), 024307; DOI:10.1063/1.4926533, **Ruolo: corresponding author**.
- [61] Biasiolo Luca, Belpassi L., Ciancaleoni Gianluca, Macchioni Alceo, Tarantelli Francesco, and Zuccaccia Daniele, *Diffusion NMR measurements on cationic linear gold(I) complexes*, *POLYHEDRON*, **2015**, *92*, 52–59; DOI:10.1016/j.poly.2015.03.007.
- [62] Ciancaleoni Gianluca, Biasiolo Luca, Bistoni Giovanni, Macchioni Alceo, Tarantelli Francesco, Zuccaccia Daniele, and Belpassi L., *Selectively measuring back-donation in gold(I) complexes by NMR spectroscopy*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2015**, *21*, 2467–2473; DOI:10.1002/chem.201406049, **Ruolo: corresponding author**.
- [63] G. Ciancaleoni, Belpassi L., D. Zuccaccia, F. Tarantelli, and P. Belanzoni, *Counterion Effect in the Reaction Mechanism of NHC Gold(I)-Catalyzed Alkoxylation of Alkynes: Computational Insight into Experiment*, *ACS CATALYSIS*, **2015**, *5*, 803–814; DOI:10.1021/cs501681f.

- [64] Biasiolo Luca, Ciancaleoni Gianluca, Belpassi L., Bistoni Giovanni, Macchioni Alceo, Tarantelli Francesco, and Zuccaccia Daniele, *Relationship between the anion/cation relative orientation and the catalytic activity of nitrogen acyclic carbenegold catalysts*, *CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY*, **2015**, *5*, 1558–1567; DOI:10.1039/C4CY01440E.
- [65] David Cappelletti, Alessio Bartocci, Felice Grandinetti, Stefano Falcinelli, Belpassi L., Francesco Tarantelli, and Fernando Pirani, *Experimental Evidence of Chemical Components in the Bonding of Helium and Neon with Neutral Molecules*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2015**, *21*, 6234–6240; DOI:10.1002/chem.201406103.
- [66] Bistoni Giovanni, Rampino Sergio, Tarantelli Francesco, and Belpassi L., *Charge-displacement analysis via natural orbitals for chemical valence: Charge transfer effects in coordination chemistry*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, **2015**, *142*, 084112; DOI:10.1063/1.4908537, **Ruolo: corresponding author**.
- [67] Gaggioli Carlo Alberto, Ciancaleoni Gianluca, Biasiolo Luca, Bistoni Giovanni, Zuccaccia Daniele, Belpassi L., Belanzoni Paola, and Tarantelli Francesco, *Anomalous ligand effect in gold(I)-catalyzed intramolecular hydroamination of alkynes*, *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, **2015**, *51*, 5990–5993; DOI:10.1039/c5cc00894h, **Ruolo: corresponding author**.
- [68] Bartocci Alessio, Belpassi L., Cappelletti David, Falcinelli Stefano, Grandinetti Felice, Tarantelli Francesco, and Pirani Fernando, *Catching the role of anisotropic electronic distribution and charge transfer in halogen bonded complexes of noble gases*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, **2015**, *142*, 184304; DOI:10.1063/1.4919692.
- [69] Bartocci Alessio, Frati Federica, Roncaratti Luiz F., Cappelletti David, Tarantelli Francesco, Belpassi L., and Pirani Fernando, *An ab initio electronic density study of the CH<sub>4</sub>Ar, CH<sub>4</sub>Xe, CH<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O and CH<sub>4</sub>H<sub>2</sub>S complexes: insights into the nature of the intermolecular interaction*, *MOLECULAR PHYSICS*, **2015**, *113*, 3992–3999; DOI:10.1080/00268976.2015.1100344.
- [70] Cappelletti David, Bartocci Alessio, Frati Federica, Roncaratti Luiz F, Belpassi L., Tarantelli Francesco, Lakshmi Prabha Aiswarya, Arunan Elangannan, and Pirani Fernando, *H<sub>2</sub>O-CH<sub>4</sub> and H<sub>2</sub>S-CH<sub>4</sub> complexes: a direct comparison through molecular beam experiments and ab initio calculations*, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, **2015**, *17*, 30613–30623; DOI:10.1039/c5cp03704b.
- [71] Azzopardi Keith M, Bistoni Giovanni, Ciancaleoni Gianluca, Tarantelli Francesco, Zuccaccia Daniele, and Belpassi L., *Quantitative assessment of the carbocation/carbene character of the gold-carbene bond*, *DALTON TRANSACTIONS*, **2015**, *44*, 13999–14007; DOI:10.1039/c5dt02183a, **Ruolo: corresponding author**.
- [72] Ronca Enrico, Angeli Celestino, Belpassi L., De Angelis Filippo, Tarantelli Francesco, and Pastore Mariachiara, *Density Relaxation in Time-Dependent Density Functional Theory: Combining Relaxed Density Natural Orbitals and*

- Multireference Perturbation Theories for an Improved Description of Excited States*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2014**, *10*, 4014–4024; DOI:10.1021/ct5004675.
- [73] Enrico Ronca, Mariachiara Pastore, Belpassi L., Filippo De Angelis, Celestino Angeli, Renzo Cimiraglia, and Francesco Tarantelli, *Charge-displacement analysis for excited states*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, **2014**, *140*, 054110; DOI:10.1063/1.4863411.
- [74] Rampino Sergio, Belpassi L., Tarantelli Francesco, and Storchi Lorian, *Full Parallel Implementation of an All-Electron Four-Component DiracKohn-Sham Program*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2014**, *10*, 3766–3776; DOI:10.1021/ct500498m, **Ruolo: corresponding author**.
- [75] Ciancaleoni Gianluca, Scafuri Nicola, Bistoni Giovanni, Macchioni Alceo, Tarantelli Francesco, Zuccaccia Daniele, and Belpassi L., *When the Tolman electronic parameter fails: a comparative DFT and charge displacement study of  $[(L)Ni(CO)]^{0/-}$  and  $[(L)Au(CO)]^{0/-}$* , *INORGANIC CHEMISTRY*, **2014**, *53*, 9907–9916; DOI:10.1021/ic501574e, **Ruolo: corresponding author**.
- [76] Biasiolo L., Trinchillo M., Belanzoni P., Belpassi L., Busico V., Ciancaleoni G., D'Amora A., Macchioni A., Tarantelli F., and Zuccaccia D., *Unexpected anion effect in the alkoxylation of alkynes catalyzed by N-Heterocyclic Carbene (NHC) cationic gold complexes*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2014**, *20*, 14594–14598; DOI:10.1002/chem.201404539.
- [77] Ciancaleoni G., Rampino S., Zuccaccia D., Tarantelli F., Belanzoni P., and Belpassi L., *An ab initio benchmark and DFT validation study on Gold(I)-catalyzed hydroamination of alkynes*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2014**, *10*, 1021–1034; DOI:10.1021/ct400980w, CHIM/03.
- [78] Alessio Bartocci, David Cappelletti, Fernando Pirani, Francesco Tarantelli, and Belpassi L., *Intermolecular Interaction in the  $H_2SH_2$  Complex: Molecular Beam Scattering Experiments and Ab-Initio Calculations*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A*, **2014**, *118*, 6440–6450; DOI:10.1021/jp502170g.
- [79] Marchione Demian, Belpassi L., Bistoni Giovanni, Macchioni Alceo, Tarantelli Francesco, and Zuccaccia Daniele, *The Chemical Bond in Gold(I) Complexes with N-Heterocyclic Carbenes*, *ORGANOMETALLICS*, **2014**, *33*, 4200–4208; DOI:10.1021/om5003667, **Ruolo: corresponding author**.
- [80] Ronca Enrico, Belpassi L., and Tarantelli Francesco, *A quantitative view of charge transfer in the hydrogen bond: the water dimer case*, *CHEMPHYSCHEM*, **2014**, *15*, 2682–2687; DOI:10.1002/cphc.201402321.
- [81] Storchi L, Rampino S, Belpassi L., Tarantelli F, and Quincy HM, *Efficient Parallel All-Electron Four-Component Dirac-Kohn Sham Program Using a Distributed Matrix Approach II*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2013**, *9*, 5356–5364; DOI:10.1021/ct400752s.

- [82] Bistoni G, Belpassi L., and Tarantelli F, *Disentanglement of Donation and Back-Donation Effects on Experimental Observables: A Case Study of Gold-Ethyne Complexes*, *ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION*, **2013**, *52*, 11599–11602; DOI:10.1002/anie.201305505, **Ruolo: corresponding author**.
- [83] Pirani F, Cappelletti D, Belpassi L., and Tarantelli F, *Intermolecular Interaction in the NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub> Complexes by Molecular Beam Scattering Experiments: The Role of Charge Transfer*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A*, **2013**, *117*, 12601–12607; DOI:10.1021/jp408214p.
- [84] Ronca E., Pastore M., Belpassi L., Tarantelli F., and De Angelis F., *Influence of the dye molecular structure on the TiO<sub>2</sub> conduction band in dye-sensitized solar cells: disentangling charge transfer and electrostatic effects*, *ENERGY & ENVIRONMENTAL SCIENCE*, **2013**, *6*, 183–193; DOI:10.1039/C2EE23170K.
- [85] Ciancaleoni G., Belpassi L., Tarantelli F., Zuccaccia D., and Macchioni A., *A combined NMR/DFT study on the ion pair structure of [(PR<sub>12</sub>R<sub>2</sub>)Auη<sup>2</sup>-3-hexyne]BF<sub>4</sub> complexes*, *DALTON TRANSACTIONS*, **2013**, *42*, 4122–4131; DOI:10.1039/C2DT32260A.
- [86] D. Zuccaccia, Belpassi L., A. Macchioni, and F. Tarantelli, *Ligand Effects on Bonding and Ion Pairing in Cationic Gold(I) Catalysts Bearing Unsaturated Hydrocarbons*, *EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY*, **2013**, *2013*, 4121–4135; DOI:10.1002/ejic.201300285, **Ruolo: corresponding author**.
- [87] Ciancaleoni G., Biasiolo L., Bistoni G., Macchioni A., Tarantelli F., Zuccaccia D., and Belpassi L., *NHC-Gold-Alkyne Complexes: Influence of the Carbene Backbone on the Ion Pair Structure*, *ORGANOMETALLICS*, **2013**, *32*, 4444–4447; DOI:10.1021/om4005912, **Ruolo: corresponding author**.
- [88] Cappelletti D, Ronca E, Belpassi L., Tarantelli F, and Pirani F, *Revealing Charge-Transfer Effects in Gas-Phase Water Chemistry*, *ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH*, **2012**, *45*, 1571–1580; DOI:10.1021/ar3000635.
- [89] F. Pirani, P. Candori, M. S. Pedrosa Mundim, Belpassi L., F. Tarantelli, and D. Cappelletti, *On the role of charge transfer in the stabilization of weakly bound complexes involving water and hydrogen sulphide molecules*, *CHEMICAL PHYSICS*, **2012**, *398*, 176–185; DOI:10.1016/j.chemphys.2011.03.030, **Ruolo: corresponding author**.
- [90] Belpassi L., L. Storchi, H.M. Quiney, and F. Tarantelli, *Recent advances and perspectives in four-component Dirac-Kohn-Sham calculations*, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, **2011**, *13*, 12368–12394; DOI:10.1039/C1CP20569B, **Ruolo: corresponding author**.
- [91] D. Cappelletti, P. Candori, F. Pirani, Belpassi L., and F. Tarantelli, *Nature and Stability of Weak Halogen Bonds in the Gas Phase: Molecular Beam Scattering Experiments and Ab Initio Charge Displacement Calculations*, *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, **2011**, *11*, 4279–4283; DOI:10.1021/cg200890h, **CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**.

- [92] Bistoni G., Belpassi L., Tarantelli F., Pirani F., and Cappelletti D., *Charge-Displacement Analysis of the Interaction in the Ammonia-Noble Gas Complexes*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A*, **2011**, *115*, 14657-14666; DOI:10.1021/jp208859x, **Ruolo: corresponding author**.
- [93] F. Pirani, L. F. Roncaratti, Belpassi L., F. Tarantelli, and D. Cappelletti, *Molecular-beam study of the ammonianoble gas systems: Characterization of the isotropic interaction and insights into the nature of the intermolecular potential*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, **2011**, *135*, 194301-1-194301-7; DOI:10.1063/1.3660199.
- [94] Valore A, Cariati E, Righetto S, Dominique R, Francesca T, Ugo R, Fraga' I. L, Fraga' M. E, Malandrino G, De Angelis F, Belpassi L., Ledoux-rak I, Hoang Thi K, and Zyss J, *Fluorinated beta-Diketonate Diglyme Lanthanide Complexes as New Second-Order Nonlinear Optical Chromophores: The Role of f Electrons in the Dipolar and Octupolar Contribution to Quadratic Hyperpolarizability*, *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, **2010**, *132*, 4966-4970; DOI:10.1021/ja101081q.
- [95] N. Salvi, Belpassi L., and F. Tarantelli, *On the Dewar-Chatt-Duncanson model for catalytic gold(I) complexes*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2010**, *16*, 7231-7240; DOI:10.1002/chem.201000608.
- [96] Belpassi L., M.L. Reca, F. Tarantelli, L.F. Roncaratti, F. Pirani, D. Cappelletti, A. Faure, and Y. Scribano, *Charge transfer energy in the water-hydrogen molecular aggregate probed by molecular-beam scattering experiments, charge displacement analysis, and ab-initio calculations*, *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, **2010**, *132*, 13046-13058; DOI:10.1021/ja1056642, **Ruolo: corresponding author**.
- [97] D. Zuccaccia, Belpassi L., L. Rocchigiani, F. Tarantelli, and A. Macchioni, *A Phosphine Gold(I) pi-Alkyne Complex: Tuning Metal-Alkyne Bond Character and Counterion Position by the Choice of the Ancillary Ligand*, *INORGANIC CHEMISTRY*, **2010**, *49*, 3080-3082; DOI:10.1021/ic100093n.
- [98] L. Storch, Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H.M. Quiney, *An efficient parallel all-electron 4-component Dirac-Kohn-Sham method using a distributed matrix approach*, *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, **2010**, *6*, 384-394; DOI:10.1021/ct900539m.
- [99] Mosconi E, De Angelis F, Belpassi L., Tarantelli F, and Alunni S, *DFT studies of b-elimination reactions in water solution with different bases: Theory vs experiment.*, *JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. THEOCHEM*, **2010**, *940*, 103-114; DOI:10.1016/j.theochem.2009.10.016.
- [100] Salvi N., Belpassi L., Zuccaccia D., Tarantelli F., and Macchioni A., *Ion pairing in NHC gold(I) olefin complexes: A combined experimental/theoretical study*, *JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY*, **2010**, *695*, 2679-2686; DOI:10.1016/j.jorganchem.2010.08.035.
- [101] L.F. Roncaratti, Belpassi L., D. Cappelletti, F. Pirani, and F. Tarantelli, *Molecular-beam scattering experiments and theoretical calculations probing*

- charge transfer in weakly bound complexes of water, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A*, **2009**, *113*, 15223-15232; DOI:10.1021/jp905584p.
- [102] De Angelis F, Belpassi L., and Fantacci S, *Spectroscopic properties of cyclometallated iridium complexes by TDDFT*, *JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. THEOCHEM*, **2009**, *914*, 74-86; DOI:10.1016/j.theochem.2009.07.025.
- [103] Mroz W, Bombenger J. P, Botta C, Biroli O. A, Pizzotti M, De Angelis F, Belpassi L., Tubino R, and Meinardi F, *Oligothiophenes Nano-organized on a Cyclotetrasiloxane Scaffold as a Model of a Silica-Bound Monolayer: Evidence for Intramolecular Excimer Formation*, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **2009**, *15*, 12791-12798; DOI:10.1002/chem.200901307.
- [104] Belpassi L., Tarantelli F., Pirani F., Candori P., and Cappelletti D., *Experimental and theoretical evidence of charge transfer in weakly bound complexes of water*, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, **2009**, *11*, 9970-9975; DOI:10.1039/b914792f.
- [105] E. Mosconi, F. De Angelis, Belpassi L., F. Tarantelli, and S. Alunni, *Merging of E2 and E1cb reaction mechanisms: a combined theoretical and experimental study*, *EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*, **2009**, *2009*, 5501-5504; DOI:10.1002/ejoc.200900906.
- [106] D. Zuccaccia, Belpassi L., F. Tarantelli, and A. Macchioni, *Ion Pairing in Cationic Olefin-Gold(I) Complexes*, *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, **2009**, *131*, 3170-3171; DOI:10.1021/ja809998y.
- [107] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H.M. Quiney, *All-electron four-component Dirac-Kohn-Sham procedure for large molecules and clusters containing heavy elements*, *PHYSICAL REVIEW. B, CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS*, **2008**, *77*, --; DOI:10.1103/PhysRevB.77.233403, **Ruolo: corresponding author**.
- [108] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H.M. Quiney, *Poisson-transformed density fitting in relativistic 4-component Dirac-Kohn-Sham theory*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, **2008**, *128*, 124108; DOI:10.1063/1.2868770, **Ruolo: corresponding author**.
- [109] Belpassi L., I. Infante, F. Tarantelli, and L. Visscher, *The chemical bond between Au(I) and the noble gases. Comparative study of NgAuF and NgAu+ (Ng = Ar, Kr, Xe) by Density Functional and Coupled Cluster methods*, *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, **2008**, *130*, 1048-1060; DOI:10.1021/ja0772647, **Ruolo: corresponding author**.
- [110] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, A. Goetz, and L. Visscher, *An indirect approach to the determination of the nuclear quadrupole moment by 4-component relativistic DFT in molecular calculations*, *CHEMICAL PHYSICS LETTERS*, **2007**, *442*, 233-237; DOI:10.1016/j.cplett.2007.05.108, **Ruolo: corresponding author**.
- [111] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, H.M. Quiney, J.N.P. van Stralen, and L. Visscher, *Nuclear electric quadrupole moment of*

- gold, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 2007, 126, 064314; DOI:10.1063/1.2436881, Ruolo: corresponding author.
- [112] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H.M. Quiney, *The electronic structure of alkali aurides. A four-component Dirac-Kohn-Sham study*, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A*, 2006, 110, 4543–4554; DOI:10.1021/jp054938w, Ruolo: corresponding author.
- [113] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H.M. Quiney, *Electron density fitting for the Coulomb problem in relativistic density functional theory*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 2006, 124, 124104; DOI:10.1063/1.2179420, Ruolo: corresponding author.
- [114] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H.M. Quiney, *Computational strategies for a four-component Dirac-Kohn-Sham program: Implementation and first applications*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 2005, 122, 184109; DOI:10.1063/1.1897383, Ruolo: corresponding author.
- [115] Belpassi L., Storchi L., Tarantelli F., Sgamellotti A., and Quiney H.M., *Parallelization of a relativistic DFT code*, *FUTURE GENERATION COMPUTER SYSTEMS*, 2004, 20, 739–747; DOI:10.1016/j.future.2003.11.016.

**Capitoli di libri, pubblicazioni non ISI, atti di congressi comunque dotati di ISBN o ISSN**

- [116] Lemishko Kateryna M., Bistoni Giovanni, Belpassi L., Tarantelli Francesco, Montero-Campillo M. Merced, and Yanez Manuel, In *Applications of topological methods in molecular chemistry*; Springer International Publishing, 2016; chapter *Charge transfer in beryllium bonds and cooperativity of beryllium and halogen bonds. A new perspective*, pages 461–489; ISBN:978-3-319-29020-1; DOI:10.1007/978-3-319-29022-5\_17.
- [117] F. Tarantelli, Belpassi L., and L. Storchi, In *Parallel Computing: From Multicores and GPU's to Petascale*; IOS Press: Amsterdam – NLD, 2010; chapter *Chemical Characterization of Super-Heavy Elements by Four-Component DFT*, pages 501–512; ISBN:9781607505297; DOI:10.3233/978-1-60750-530-3-501.
- [118] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, H.M. Quiney, J.N.P. van Stralen, and L. Visscher, In *Science and Supercomputing in Europe*; CINECA Consorzio Interuniversitario: BOLOGNA – ITA, 2007; chapter *The nuclear electric quadrupole moment of gold*, pages 107–112; ISBN: 9788886037211.
- [119] L. Belpassi, F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H. M. Quiney; *Computational strategies based on electron density fitting in relativistic density functional theory*; In Simos, T and Maroulis, G, Eds., *RECENT PROGRESS IN COMPUTATIONAL SCIENCES AND ENGINEERING, VOLS 7A AND 7B*, Vol. 7A-B of *LECTURE SERIES ON COMPUTER AND COMPUTATIONAL SCIENCES*, pages 854–857, PO BOX 9000, 2300 PA LEIDEN, NETHERLANDS, 2006. VSP BV-C/O BRILL ACAD PUBL; International Conference on Computational Methods in Science and Engineering, Chania, GREECE, OCT 27-NOV 01, 2006; ISSN:1573-4196; ISBN:978-90-04-15542-8.
- [120] Belpassi L., F. Tarantelli, A. Sgamellotti, and H.M. Quiney, In *Recent Progress in Computational Sciences and Engineering*; CRC Press, 2006; Vol. 7B; chapter *Computational*

- strategies based on electron density fitting in relativistic Density Functional Theory*, pages 854–857; ISBN: 9789004155428; DOI: 10.1201/b12066-14.
- [121] Storchi L, Belpassi L., Tarantelli F, Sgamellotti A, and Quiney H, In *Science and Supercomputing at CINECA 2005 report*; Marco Voli. Patrizia Coluccia: ITA, 2006; chapter Parallelization of relativistic DFT. pages 212–215; ISBN: 88-86037-16-3; DOI:10.1388/SSC(2005)-CM-212.
- [122] Belpassi L., A. Bartocci, D. Cappelletti, S. Falcinelli, F. Pirani, and F. Tarantelli; Revealing charge transfer in gas-phase: Systems with halogen and hydrogen bonds; In *ISXB1 2014 1st International Symposium on Halogen Bonding*, page 111. Poliscrypt 2014 – Politecnico di Milano, First Ed., 2014; ISBN: 97888-6493-025-1.
- [123] Bartocci A., Belpassi L., Cappelletti D., Falcinelli S., Pirani F., and Tarantelli F.; Weak halogen bond in gas-phase systems: Molecular beam scattering experiments and ab-initio calculations; In *ISXB1 2014 1st International Symposium on Halogen Bonding*, pages 111. Poliscrypt 2014–Politecnico di Milano, First Ed., 2014; ISBN: 97888-6493-025-1.
- [124] Alceo Macchioni, Leonardo Belpassi, Gianluca Ciancaleoni, Francesco Tarantelli, and Daniele Zuccaccia, *Linear gold(I) complexes: A systematic NMR/DFT study on the ligand effect on the structure of the ion pair in solution*, APR 7 , 2013, 245; 245th National Spring Meeting of the American-Chemical-Society (ACS), New Orleans, LA, APR 07-11, 2013; ISSN: 0065-7727.
- [125] Francesco Tarantelli, Leonardo Belpassi, and Michael Reca, *CHED 300-Charge transfer studies on simple molecular adducts of water and ammonia*, AUG 16 , 2009, 238; Meeting of the American-Chemical-Society (ACS), AUG 16, 2009; ISSN: 0065-7727.

Perugia , 19/06/2024

LEONARDO  
BEPASSI