



Stefano Russo

ESPERIENZA LAVORATIVA

[01/2024 – Attuale]

Post-Doc - Computational and Theoretical Chemistry

University of Rome "Sapienza"

Città: Rome | Paese: Italia

Classical Molecular Simulations of Electrolytes for Al-S Batteries

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

[2020 – 2023]

Phd - Computational Chemistry

University of Rome "Sapienza" <https://www.chem.uniroma1.it>

Città: Rome | Paese: Italia |

- Parametrization of Ionic Liquids based on Amino Acids
- DFT and MP2 Calculations
- Polarizable AMOEBA FF
- Molecular Dynamic Simulations

[2017 – 2019]

M.Sc. Degree

University of Rome "Sapienza" <https://www.chem.uniroma1.it>

Indirizzo: Piazzale Aldo Moro, 5, 00185, Rome, Italia | **Campi di studio:** Scienze naturali, matematiche e statistiche: • *Chimica* | **Voto finale:** 110 with honours | **Livello EQF:** Livello 7 EQF | **Tesi:** Studio teorico sulla stereoselettività di reazioni aldoliche intramolecolari organo-catalizzate

[2013 – 2016]

B.Sc. Degree

University of Rome "Sapienza" <https://www.chem.uniroma1.it>

Indirizzo: Piazzale Aldo Moro, 5, 00185, Rome, Italia | **Campi di studio:** Scienze naturali, matematiche e statistiche: • *Chimica* | **Voto finale:** 104 /110 | **Tesi:** Studio della struttura di dipeptidi ciclici mediante spettroscopia computazionale

COMPETENZE LINGUISTICHE

Lingua madre: italiano

Altre lingue:

inglese

ASCOLTO B2 LETTURA B2 SCRITTURA B2

PRODUZIONE ORALE B1 INTERAZIONE ORALE B1

Livelli: A1 e A2: Livello elementare B1 e B2: Livello intermedio C1 e C2: Livello avanzato

COMPETENZE DIGITALI

Le mie competenze digitali

Gaussian | Molecular Dynamics | Bash | Python | Pandas | Numpy | Mathplotlib | Linux | Tinker | HPC user | Orca | Gromacs

PUBBLICAZIONI

[2021]

["Assessing the Propensity Toward Ionization in Nanosized Clusters of Protic Ionic Liquids by Ab-initio Methods"](#)

Riferimento: A. Le Donne, S. Russo, E. Bodo, Chem. Phys. 552, 111365

- [2022] [A Computational Analysis of the Reaction of SO₂ with Amino Acid Anions: Implications for Its Chemisorption in Biobased Ionic Liquids](#)
Riferimento: V. Piacentini, A. Le Donne, S. Russo, E. Bodo, *Molecules*, 27(11):3604
- [2022] [A polarisable force field for bio-compatible ionic liquids based on amino acids anions](#)
Riferimento: S. Russo, E. Bodo, *Molecular Simulation*, 08, 1:10
- [2024] [Solvation of Model Biomolecules in Choline-Aminoate Ionic Liquids: A Computational Simulation Using Polarizable Force Fields](#)
 S.Russo, E.Bodo, *Mol.* 29(7), 1524

PRESENTAZIONI A CONGRESSI SCIENTIFICI

- [09/2021] **Structural and energetic validation of new amoeba parameters of bio-compatible ionic liquids**
 S. Russo e E. Bodo, Congresso "SCI2021" (online), Poster
- [06/2022] **Polarizable force field for Bio-compatible Ionic Liquids**
 S.Russo, E.Bodo, "Sync2022" (Roma), Oral Communication
- [07/2022] **Polarizable force field for Bio-compatible Ionic Liquids**
 S.Russo E.Bodo, CNCF2022, (Genova), Oral Communication
- [09/2022] **Modelling amino-acid based ionic liquids with polarizable force field**
 S.Russo E.Bodo, DCTC2022 (Modena) 2022
- [09/2022] **Computational approaches for biocompatible ionic liquids**
 E. Bodo, S.Russo, A. Delle Donne DCTC2022 (Modena), Oral Communication
- [05/2023] **Polarizable simulation of amino-acid based ionic liquids**
 S. Russo, E.Bodo, Cqe Days (Lisboa), Poster
- [09/2023] **Polarizable Simulations: a study of ions interaction in Amino Acids Ionic Liquids**
 S. Russo, L. Morandeira, E. Bodo, DCTC2023 (Pisa), Poster
- [21/06/2024] **Simulations of Model Biological Molecules in  Choline-Amino Acid Ionic Liquids**
 S.Russo, E. Bodo, SYNC 2024 (Rome), Oral Communication
- [08/2024] **Locally Concentrated Solvents on Low Temperature Aluminium-Sulfur batteries, a Computational Investigation**
 S. Russo, E. Bodo, SCI 2024 (Milan), Poster

GRANT FUNDING

EuroHPC regular access

project n° EHPC-BEN-2023B04-010, as Collaborator

Avvio alla Ricerca 2022

Bando per la Ricerca di Ateneo 2022 Prot. n. 39677, as PI

PRACE Preparatory Access

proposal n° 2010PA5921, as PI

ISCRA Regular Access

proposal n° HP10C8ZMXN, as Collaborator

ISCRA C

Proposal n° HP10C1W2Q6, as PI

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali presenti nel CV ai sensi dell'art. 13 d. lgs. 30 giugno 2003 n. 196 - "Codice in materia di protezione dei dati personali" e dell'art. 13 GDPR 679/16 - "Regolamento europeo sulla protezione dei dati personali".