

# Curriculum Vitae Europass



## Informazioni Personali

Nome Cognome  
Nazionalità

**Mariagrazia Fortino**  
Italiana

## Carriera accademica

01/07/2020 - oggi	Assegno di ricerca per il settore scientifico disciplinare CHIM/03 relativo al programma di ricerca "Sviluppo di metodi basati sulla teoria del funzionale della densità per la progettazione di molecole fotoattive", presso l'Università degli Studi "Magna Graecia" di Catanzaro.
23/10/2018 - 22/10/2019	Assegno di ricerca per il settore scientifico disciplinare CHIM/02 relativo al programma di ricerca "Applicazione e validazione di nuovi modelli teorici per lo studio di proprietà elettroniche di cromofori", presso la Scuola Normale Superiore di Pisa.
15/06/2017 - 14/06/2018	Assegno di ricerca per il settore scientifico disciplinare CHIM/02 relativo al programma di ricerca "Investigazione teorica di proprietà spettroscopiche di molecole organiche per celle fotovoltaiche ibride", presso l'Università di Modena e Reggio Emilia.
Dicembre 2016	Abilitazione alla professione di chimico, conseguita presso l'Università della Calabria (Dicembre 2016).
Dicembre 2015	Dottorato in Metodologie Chimiche Inorganiche, conseguito presso l'Università della Calabria (XXVIII Ciclo).
Ottobre 2013 - Aprile 2014	Periodo di ricerca dottorale all'estero, presso University of Calgary - Canada (dal 3-10-2013 al 06-04-2014).
A.A. 2011/2012	Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, conseguita con votazione 110/110 con lode presso l'Università della Calabria (A.A 2011/2012).
A.A. 2009/2010	Laurea Triennale in Chimica, conseguita con votazione 110/110 presso l'Università della Calabria (A.A 2009/2010).

## Articoli Scientifici pubblicati su riviste internazionali mediante peer-review al 26-04-2021.

- "Multi-replica biased sampling for photoswitchable  $\pi$ -conjugated polymers" M. Fortino, C. Cozza, M. Bonomi, A. Pietropaolo, J. Chem. Phys. 2021, 154, 174108-174117.
- "Unraveling the internal conversion process within the Q-bands of a chlorophyll-like-system through Surface-Hopping Molecular Dynamics Simulations " M.Fortino\*, E. Collini, J.Bloino, A. Pedone, J. Chem. Phys. 2021, 154, 094110-094120.
- "Combined Experimental and Computational Approach toward the Structural Design of Borosilicate-Based Bioactive Glasses" N. Stone-Weiss, H. Bradtmuller, M. Fortino, M.Bertani, R. E. Youngman, A. Pedone, H. Eckert, A. Goel, J. Phys. Chem. C, 2020,124, 32, 17655-17674.
- "Role of specific solute-solvent interactions on the photophysical properties of Distyryl Substituted BODIPY derivatives" M. Fortino\*, E. Collini, A. Pedone, J. Bloino, Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 10981-10994.
- "Computational Mechanistic Insights on the NO Oxidation Reaction Catalyzed by Non-Heme Biomimetic Cr-N-Tetramethylated Cyclam Complexes", T. Marino, M. Fortino, N. Russo, M. Toscano, M. E. Alberto, Int. J. Mol. Sci. 2019, 20(16), 3955.
- "Assessment of interatomic parameters for the reproduction of borosilicate glass structures via DFT-GIPAW calculations", M. Fortino, A. Berselli, N. Stone-Weiss, L. Deng, A. Goel, J. Du, A. Pedone, J. Am. Ceram. Soc. 2019, 102, 7225-7243.

"The role of the halogen bond in iodothyronine deiodinase: Dependence on chalcogen substitution in naphthyl-based mimetics", D. Cesario, M. Fortino, T. Marino, F. Nunzi, E. Sicilia, *J. Comp. Chem.*, 2019, 40, 944-951.

"On the simulation of vibrationally resolved electronic spectra of medium-size molecules: the case of styryl substituted BODIPYs", M. Fortino, J. Bloino, E. Collini, L. Bolzonello, M. Trapani, F. Faglioni, A. Pedone, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 3512-3526.

"Two-Dimensional Electronic Spectroscopy Reveals Dynamics and Mechanisms of Solvent-Driven Inertial Relaxation in Polar BODIPY Dyes", L. Bolzonello, A. Polo, A. Volpato, E. Meneghin, M. Cordaro, M. Trapani, M. Fortino, A. Pedone, M. Castriciano, E. Collini, *J. Phys. Chem. Letters*, 2018, 9, 1079-1085.

"A DFT investigation of a bulky biomimetic model catalyzing the 5'-outer ring deiodination of thyroxine", M. Fortino, T. Marino, N. Russo, E. Sicilia, *J. Mol. Model*, 2016, 22, 287-292.

"Mechanistic investigation of trimethylamine-N-oxide reduction catalysed by biomimetic molybdenum enzyme models", M. Fortino, T. Marino, N. Russo, E. Sicilia, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 8428-8436.

"Theoretical study of silver-ion-mediated Base Pairs: The case of C-Ag-C and C-Ag-A systems", M. Fortino, T. Marino, N. Russo, *J. Phys. Chem. A*, 2015, 119, 5153-5157.

"Mechanism of Thyroxine Deiodination by Naphtyl-Based Iodothyronine Deiodinase Mimics and the Halogen Bonding Role: a DFT Investigation", M. Fortino, T. Marino, N. Russo, E. Sicilia, *Chem. Eur. J.*, 2015, 21, 8554-8560.

## Attività di tutoraggio

A.A. 2021-2022	Tutor di Chimica generale ed inorganica, presso il Dipartimento di Scienze della Salute dell'Università Magna Graecia di Catanzaro (11 CFU).
A.A. 2018-2019	Tutor di Chimica generale per il Precorso di Chimica presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche dell'Università di Modena e Reggio Emilia.
A.A. 2016-2017	Tutor di Chimica generale, presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie Chimiche dell'Università della Calabria (9 CFU).
A.A. 2016-2017	Tutor di Chimica generale ed inorganica, presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie Chimiche dell'Università della Calabria (9 CFU).
A.A. 2014-2015	Tutor di Chimica organica, presso il Dipartimento di Chimica e Tecnologie Chimiche dell'Università della Calabria (6 CFU).

## Partecipazioni a Seminari e Conferenze

Giugno 2021	<i>EMMC-eSENCE Modelling Meeting 2021</i> . "Multi-replica biased sampling for predicting photoswitchable mechanism in conjugated polymers". Ruolo: Relatore.
Dicembre 2020	<i>Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation, SCI</i> . "Hamiltonian excited state Replica Exchange for photoisomerization processes in conjugated polymers". Ruolo: Relatore.
Settembre 2019	<i>VI Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale, Società Chimica Italiana</i> , Cosenza (Italia). "Theoretical Spectroscopic Investigation of Specific Solute-Solvent Interactions: Distyryl Substituted BODIPYs as Test Cases". Ruolo: Relatore.
Febbraio 2019	<i>Winter Modeling 2019, Napoli (Italy)</i> . "Simulation of vibrationally resolved electronic spectra: the case of styryl substituted BODIPYs". Ruolo: Relatore.
Settembre 2018	<i>V Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale, Società Chimica Italiana</i> , Trieste (Italia). "On the simulation of vibrationally resolved electronic spectra of medium-size molecules: the case of styryl substituted BODIPYs". (Poster).
Dicembre 2017	<i>ERC AdG-Barone DREAMS:Final Meeting Advances in computational modelling: from isolated molecules to soft matter</i> , Pisa (Italia). "Vibrationally resolved electronic spectra of styryl-substituted bodipys:benchmark of new computational protocols for the simulation". Ruolo: Relatore.

Giugno 2015

*7th International theoretical biophysics symposium TheoBio*, Cagliari (Italia). "Mechanism of Thyroxine Deiodination by Naphthyl-Based Iodothyronine Deiodinase Mimics and the Halogen Bonding Role: A DFT Investigation." (Poster).

Settembre 2015

*XXV Congresso Nazionale della società Chimica Italiana*, Cosenza (Italia). "Computational study of thyroid hormones deiodination by bio-inspired iodothyronine deiodinase complexes". (Poster).

Ottobre 2013

*Seminario, University of Calgary*, Calgary (Canada). "Selenium Naphtyl-Based compounds as mimics of Iodothyronine Deiodinase enzymes". Ruolo: Relatore.

### **Partecipazione per progetti di ricerca**

Partecipazione con il gruppo di ricerca "NanoChem" dell'Università "Magna Graecia" di Catanzaro per il progetto PRIN2017, Prot. n. 2017WBZFHL-003 (Da Luglio 2020 ad oggi)

Partecipazione con il gruppo di ricerca "SMARTLab" della Scuola Normale Superiore di Pisa per il progetto PRIN2015, Prot. n. 2015XBZ5YA (Da Giugno 2017 a Ottobre 2019)

Partecipazione con il gruppo di ricerca "CompMaterChem" dell'Università di Modena e Reggio Emilia per il progetto PRIN2015, Prot. n. 2015XBZ5YA (Da Giugno 2017 a Ottobre 2019)

Partecipazione con il gruppo di ricerca del Laboratorio "PROMOCS" dell'Università della Calabria, per il progetto di ricerca dottorale (Da Ottobre 2012 a Ottobre 2015)

Partecipazione con il gruppo di ricerca del "Center of Molecular Simulations" dell'University of Calgary, per il progetto di ricerca dottorale (Da Ottobre 2013 ad Aprile 2014)