

# Curriculum Vitae di Carmen Coppola

## ESPERIENZA LAVORATIVA

- 05/2024-Attuale **Assegnista di ricerca** nell'ambito del progetto "Approcci di Intelligenza artificiale, Sintesi Innovative e valutazione di sostenibilità Economico- ambientale per lo sviluppo di nuovi Materiali per la conversione e stoccaggio dell'Energia solare"  
Consiglio Nazionale Delle Ricerche-Istituto di Chimica dei Composti Organometallici (CNR-ICCOM)
- Scopo del progetto è l'applicazione di tecniche di intelligenza artificiale e metodi quantomeccanici per la progettazione di nuove strutture di fotosensibilizzatori organici con impiego in dispositivi di conversione dell'energia solare. Collaborazione allo sviluppo di procedure sintetiche innovative per la loro preparazione e all'assemblaggio di piccoli dispositivi su scala di laboratorio. Sviluppo di un modello integrato LCA e LCC per la valutazione degli impatti ambientali e dei costi economici dei processi applicati nel corso del progetto.
- 01/2024-05/2024 **Organic Chemistry Instructor**  
University of Oklahoma, affiliazione italiana ad Arezzo
- 01/2024 - 02/2024 **Prestazione d'opera occasionale**  
Consorzio per lo Sviluppo dei Sistemi a Grande Interfase (CSGI), Sesto Fiorentino 50019 (FI)
- Consulenza su nuovi materiali e processi sostenibili per tecnologie fotovoltaiche di terza generazione (Celle solari a perovskite), tramite l'uso di metodologie computazionali e Life Cycle Assessment (LCA).
- 01/2022-01/2024 **Assegnista di ricerca** nell'ambito del progetto "Nuovi materiali per fotovoltaico innovativo per applicazione indoor"  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- Scopo del progetto di ricerca è il design e la caratterizzazione, mediante le metodologie computazionali Density Functional Theory (DFT) e Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT), di nuovi materiali per lo sviluppo di Dye-Sensitized Solar Cells per applicazioni in ambienti interni.
- 07/2019-10/2022 **Tutor universitario** a sostegno degli studenti stranieri  
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- 03/2020-10/2022 **Attività didattica tutoriale in Chimica Organica** relativa all'azione 2 del Piano Nazionale Lauree Scientifiche Biologia e Biotecnologie 2017-18  
Dipartimento di Scienze della Vita (DSV), Università degli Studi di Siena, Italia
- Sostegno, tramite esercitazioni, agli studenti del Corso di Laurea in "Scienze Biologiche" per l'insegnamento "Principi di Chimica Organica".
- 01/2021-12/2021 **Attività di ricerca** nell'ambito del progetto "Analisi del ciclo di vita economico-ambientale di sistemi di accumulo del freddo basati sull'utilizzo di materiali a cambiamento di fase"  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia

12/2018-11/2020 **Early-stage researcher** per il progetto europeo "-ESPRESSO- Efficient Structures and Processes for Reliable Perovskite Solar Modules"  
Consorzio Interuniversitario per lo Sviluppo dei Sistemi a Grande Interfase (CSGI)

Progettazione e sviluppo di nuovi materiali e processi sostenibili per tecnologie fotovoltaiche di terza generazione (Celle solari a perovskite), tramite l'uso di metodologie computazionali e Life Cycle Assessment (LCA).

07/2017-06/2018 **Tutor universitario** a sostegno degli studenti stranieri  
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia

## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

10/2018-12/2021 **Dottorato di ricerca in Chemical and Pharmaceutical Sciences (Doctor Europaeus)**  
Giudizio: Eccellente  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia

Progetto di ricerca: "Design of novel organic compounds for the development of solar energy conversion devices"

Scopo del progetto di ricerca è il design e la caratterizzazione, mediante le metodologie computazionali Density Functional Theory (DFT) e Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT), di nuovi materiali per lo sviluppo di tecnologie per la conversione dell'energia solare, quali Perovskite Solar Cells, Dye-Sensitized Solar Cells e Luminescent Solar Concentrators.

06/2021-12/2021 **Visitor PhD Student (modalità virtuale)**  
Attività di formazione e ricerca in collaborazione con l'Università di Extremadura (Spagna)  
Progetto di ricerca: "Solute-solvent interactions in Luminescent Solar Concentrators: a computational study by means of ASEP/MD Solvation Method"

11/2020 **Esame di Stato di abilitazione all'esercizio della professione di Chimico**  
Università degli studi di Napoli Federico II

01/2019-05/2019 **Visitor PhD Student**  
Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi Federico II, Napoli, Italia  
Attività di formazione e ricerca presso il gruppo del prof. Michele Pavone nell'ambito del progetto "Understanding charge transfer processes at the interface between perovskite and organic hole transport materials: towards the design of more efficient and stable perovskite solar cells"

12/2016-10/2018 **Laurea Magistrale in Chemistry-Chimica LM-54** con votazione 110/110 e lode  
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia

Tesi di Laurea: "Design of novel organic hole transport materials for efficient perovskite solar cells"

08/2018 **Conseguimento dei 24 CFU** previsti dal requisito di accesso al concorso per l'ammissione al FIT

- 01/2017-02/2018 **Tirocinio curriculare in Chimica Computazionale**  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- Oggetto del tirocinio: Progettazione e caratterizzazione di nuovi materiali per la produzione di energia, tramite le metodologie computazionali Density Functional Theory (DFT) e Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT).
- 10/2013-12/2016 **Laurea Triennale in Scienze Chimiche L-27**  
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- Tesi di Laurea: "Valutazione dell'impatto ambientale del fotovoltaico innovativo di ultima generazione: le celle a perovskite"
- 09/2008-07/2013 **Diploma di maturità classica, con indirizzo classico europeo**  
Convitto Nazionale Pietro Colletta, Avellino, Italia

## ALTRE ATTIVITÀ ACCADEMICHE

- 03/2021-Attuale **Attività didattica di supporto tramite esercitazioni** per l'insegnamento "Big Data Issues in Computational Chemistry" del Corso di Laurea in Sustainable Industrial Pharmaceutical Biotechnology, collaborando con il titolare del corso (Prof. Adalgisa Sinicropi) allo svolgimento degli esami.  
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- 09/2023-01/2024 **Membro della Commissione di Esami** per l'insegnamento "Metodi Fisici in Chimica Organica" all'interno del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (titolare del corso: Prof. Adalgisa Sinicropi)  
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- 07/2024 **Correlatrice per tesi di Laurea in Chimica Organica**  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- Tesi di Laurea dal titolo: "Integrating Machine Learning with Density Functional Theory to Uncover New Organic Dyes for Indoor DSSCs", relatore: Prof. Adalgisa Sinicropi, corso di Laurea in Sustainable Industrial Pharmaceutical Biotechnology degree course
- 11/2023 **Membro del Comitato Organizzatore** del Workshop "Sustainability Assessment Of Innovative Photovoltaics 2023 Workshop" tenutosi a Siena nei giorni 14 e 15 Novembre 2023.
- 10/2021 **Correlatrice per tesi di Laurea in Chimica Organica**  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- Tesi di Laurea dal titolo: "Caratterizzazione mediante metodi DFT e TDDFT di nuovi coloranti organici contenenti indigo", relatore: Prof. Adalgisa Sinicropi, Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche

- 07/2021 **Correlatrice per tesi di Laurea in Chimica Organica**  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- Tesi di Laurea dal titolo: "Derivati tienopirazinici fluorescenti per un possibile uso in Concentratori Solari Luminescenti (LSC): uno studio mediante metodi DFT e TDDFT", relatore: Prof. Adalgisa Sinicropi, corso di Laurea in Scienze Chimiche
- 03/2020 **Attività didattica di supporto tramite esercitazioni** per l'insegnamento "Elements of Computational Organic Spectroscopy" del Corso di Laurea in Chemistry-Chimica, collaborando con il titolare del corso (Prof. Adalgisa Sinicropi) allo svolgimento degli esami.  
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- 07/2019 **Correlatrice per tesi di Laurea in Chimica Organica**  
R<sup>2</sup>ES Lab, Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia (DBCF), Università degli Studi di Siena, Italia
- Tesi di Laurea dal titolo: "Calcolo mediante TDDFT dello Stokes Shift di fluorofori organici per applicazione in concentratori solari luminescenti", relatore: Prof. Adalgisa Sinicropi, Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche

## LISTA DELLE PUBBLICAZIONI

- Xheila Yzeiri, Nicola Sangiorgi, Francesca Gambassi, Andrea Barbieri, Massimo Calamante, Daniele Franchi, **Carmen Coppola**, Adalgisa Sinicropi, Barbara Ventura, Alessandro Mordini, Alessandra Sanson, e Lorenzo Zani, **Dyes and Pigments**, 2024, 232, 112455. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2024.112455>
- Paola Fornarini, Federico Rossi, e **Carmen Coppola**, **La chimica e L'industria online | anno VIII, n° 4, luglio/agosto 2024**. <http://dx.medra.org/10.17374/CI.2024.106.4.18>
- Giulio Goti, Gianna Reginato, **Carmen Coppola**, Alessio Dessì, Daniele Franchi, Alessandro Mordini, Alberto Picchi, Andrea Pucci, Adalgisa Sinicropi, Lorenzo Zani, e Massimo Calamante, **Eur. J. Org. Chem.**, 2024, e202400112. <https://doi.org/10.1002/ejoc.202400112>
- Matteo Bartolini, Cosimo Micheletti, Alberto Picchi, **Carmen Coppola**, Adalgisa Sinicropi, Mariangela Di Donato, Paolo Foggi, Alessandro Mordini, Gianna Reginato, Andrea Pucci, Lorenzo Zani, e Massimo Calamante, **ACS Appl. Energy Mater.**, 2023, 6, 4862–4880. <https://doi.org/10.1021/acsaem.3c00362>
- Carmen Coppola**, Maria Laura Parisi, e Adalgisa Sinicropi, **Energies**, 2023, 16, 573. <https://doi.org/10.3390/en16020573>
- Luigi Angelo Castriotta, Rossella Infantino, Luigi Vesce, Maurizio Stefanelli, Alessio Dessì, **Carmen Coppola**, Massimo Calamante, Gianna Reginato, Alessandro Mordini, Adalgisa Sinicropi, Aldo Di Carlo, e Lorenzo Zani, **Energy & Environmental Materials**, 2022, e12455 <https://doi.org/10.1002/eem2.12455>
- Carmen Coppola**, Adriana Pecoraro, Ana B. Munoz-García, Rossella Infantino, Alessio Dessì, Gianna Reginato, Riccardo Basosi, Adalgisa Sinicropi, and Michele Pavone, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 2022, 24, 14993. <https://doi.org/10.1039/D2CP01270G>
- Carmen Coppola**, Rossella Infantino, Alessio Dessì, Lorenzo Zani, Maria Laura Parisi, Alessandro Mordini, Gianna Reginato, Riccardo Basosi e Adalgisa Sinicropi, **Materials Chemistry and Physics** 2022, 278, 125603.

<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.125603>

Costanza Papucci, Rima Charaf, **Carmen Coppola**, Adalgisa Sinicropi, Mariangela di Donato, Maria Taddei, Paolo Foggi, Antonella Battisti, Bastiaan de Jong, Lorenzo Zani, Alessandro Mordini, Andrea Pucci, Massimo Calamante e Gianna Reginato, **J. Mater. Chem. C** **2021**, **9**, 15608-15621. <https://doi.org/10.1039/D1TC02923A>

Giulio Goti, Massimo Calamante, **Carmen Coppola**, Alessio Dessi, Daniele Franchi, Alessandro Mordini, Adalgisa Sinicropi, Lorenzo Zani e Gianna Reginato, **Eur. J. Org. Chem.** **2021**, **2021**, 2655 – 2664. <https://doi.org/10.1002/ejoc.202100199>

Costanza Papucci, Alessio Dessi, **Carmen Coppola**, Adalgisa Sinicropi, Greta Santi, Mariangela Di Donato, Maria Taddei, Paolo Foggi, Lorenzo Zani, Gianna Reginato, Andrea Pucci, Massimo Calamante e Alessandro Mordini, **Dyes and Pigments** **2021**, **188**, 109207. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109207>

**Carmen Coppola**, Alessio D'Ettore, Maria Laura Parisi, Lorenzo Zani, Gianna Reginato, Massimo Calamante, Alessandro Mordini, Maurizio Taddei, Riccardo Basosi e Adalgisa Sinicropi, **Inorganica Chimica Acta** **2021**, **518**, 120233. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.120233>

Daniele Franchi, Massimo Calamante, **Carmen Coppola**, Alessandro Mordini, Gianna Reginato, Adalgisa Sinicropi e Lorenzo Zani, **Molecules** **2020**, **25**, 3377. <https://doi.org/10.3390/molecules25153377>

Marco Paolino, Annalisa Reale, Vincenzo Razzano, Gianluca Giorgi, Germano Giuliani, Francesca Villafiorita- Monteleone, Chiara Botta, **Carmen Coppola**, Adalgisa Sinicropi e Andrea Cappelli, Design, **New J. Chem.**, **2020**, **44**, 13644- 13653. <https://doi.org/10.1039/D0NJ02429E>

Sanaz Mohammadpourasl, Fabrizia Fabrizi de Biani, **Carmen Coppola**, Maria Laura Parisi, Lorenzo Zani, Alessio Dessi, Massimo Calamante, Gianna Reginato, Riccardo Basosi e Adalgisa Sinicropi, **Energies** **2020**, **13**, 2032. <https://doi.org/10.3390/en13082032>

## CONVEGNI E SCUOLE

26/08/2024-30/08/2024	“XXVIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana” (Milano, Italia) <b>Presentazione di un poster:</b> “Novel organic dyes for indoor dye-sensitized solar cells: a machine learning and density functional theory study”
04/07/2024-05/07-2024	“1st Indoor Photovoltaics Conference” (IPVC-1)” (Tampere, Finlandia) <b>Presentazione orale</b> dal titolo: “Novel organic dyes for indoor dye-sensitized solar cells by combining machine learning and density functional theory methods”
11/06/2024-12/06/2024	“Seconda Conferenza della Rete Italiana del Fotovoltaico” (Bolzano, Italia) <b>Presentazione di un poster</b> dal titolo: “Indoor dye-sensitized solar cells: a machine learning and density functional theory study for the discovery of novel organic dyes
10/09/2023-14/09/2023	“XLI Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica (CDCO)” (Roma, Italia) <b>Presentazione di un poster</b> dal titolo: “An in-silico model of Bacteriorhodopsin/TiO <sub>2</sub> hybrid system: toward the understanding of molecular factors influencing the performance of bio-inspired solar energy conversion devices”
22/06/2023-23/06/2023	“Conferenza 2023 della Rete Italiana del Fotovoltaico (RetelFV)” (Milano, Italia) <b>Presentazione di un poster</b> dal titolo: “Unveiling the electronic structure and the interfacial

	features of a novel triphenylamine- and phenothiazine-based hole transport material (HTM1) with MAPI perovskite: a Density Functional Theory study”.
11/09/2022-15/09/2022	<p>“XL Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica (CDCO)” (Palermo, Italia)</p> <p><b>Presentazione orale</b> dal titolo “A first-principles study on the electronic properties of a novel TPA and PTZ-based hole transport material and its interfacial features with MAPI perovskite”</p>
04/07/2022-07/04/2022	<p>“XLVIII Congresso Nazionale di Chimica Fisica - La Chimica Fisica e le Sfide della Transizione Ecologica” (Genova, Italia)</p> <p><b>Presentazione orale</b> dal titolo: “Density Functional Theory study on the electronic properties of a novel TPA and PTZ-based hole transport material and its interfacial features with MAPI perovskite”</p>
22/11/2021-24/11/2021	<p>“Merck Young Chemist’s Symposium 2021” (Rimini, Italia)</p> <p><b>Presentazione orale</b> dal titolo “Interfacial charge transfer process between lead halide perovskite and a novel triphenylamine/phenothiazine-based hole transport material: a first-principles study”</p>
14/09/2021-23/09/2021	<p>“XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana” (Online)</p> <p><b>Presentazione di un poster</b> dal titolo “DFT and TDDFT investigation of novel organic catechol-based sensitizers for type II Dye Sensitized Solar Cells (DSSCs)”</p>
17/02/2020-18/02/2020	<p>“Machine learning meets Chemistry” (Dipartimento di Chimica dell’Università di Torino, Torino, Italia)</p>
12/02/2020-14/02/2020	<p>“EnerCHEM 2-Congresso Nazionale del Gruppo Interdivisionale di Chimica per le Energie Rinnovabili” (Padova, Italia)</p> <p><b>Presentazione di un poster</b> dal titolo “Understanding the interfacial charge transfer between the lead halide perovskite and novel phenothiazine-based organic hole transport materials”</p>
25/11/2019-27/11/2019	<p>“Merck Young Chemist’s Symposium 2019” (Rimini, Italia)</p> <p><b>Presentazione orale flash e presentazione di un poster</b> dal titolo “In silico design of novel organic hole transport materials for perovskite solar cells”</p>
16/09/2019-20/09/2019	<p>“Quantum Espresso Summer School on Advanced Materials and Molecular Modelling” (Jozef Stefan Institute, Lubiana, Slovenia)</p>
08/09/2019-12/09/2019	<p>“XXXIX Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica della Società Chimica Italiana” (Torino, Italia)</p> <p><b>Presentazione di un poster</b> dal titolo “Design of novel organic hole transport materials for perovskite solar cells”</p>
10/06/2019-14/06/2019	<p>“VIII Ciamician Photochemistry School. From Fundamentals to Applications” (Università degli Studi di Bologna, Bologna, Italia)</p>
14/02/2019	<p>“Winter Modeling 2019” (Napoli, Italia)</p>
22/06/2017-23/06/2017	<p>Convegno dell’Associazione Rete Italiana LCA 2017- “Resource Efficiency &amp; Sustainable Development Goals: Il Ruolo del Life Cycle Thinking” (Università degli Studi di Siena, Siena, Italia)</p>

## RETI E AFFILIAZIONI

### **Società Chimica Italiana**

Iscritta alla Divisione di Chimica Organica e al Gruppo Interdivisionale Energie Rinnovabili-Enerchem

### **Consorzio Interuniversitario per lo sviluppo dei Sistemi a Grande Interfase**

### **Associazione Italiana Sommelier**

(Diploma conseguito nel 2023)

### **Pint of Science Italia**

## COMPETENZE LINGUISTICHE

### MADRELINGUA

Italiano

### ALTRE LINGUE

#### **Inglese**

- Capacità di lettura B2
- Capacità di scrittura B2
- Capacità di espressione orale B2

#### **Francese**

- Capacità di lettura B1
- Capacità di scrittura B1
- Capacità di espressione orale B1

## CAPACITÀ E COMPETENZE TECNICHE

Ottima conoscenza dei sistemi operativi Unix, Linux, Macintosh e Windows.

Programmi di simulazione al computer e analisi computazionale (Gaussian09, Gaussian16, SIESTA, Vasp, Tinker, Avogadro, Molden, VMD, GaussSum, Vesta, ChemSketch).