



Franz Saija



Data di nascita: 17/07/1969 **Nazionalità:** Italiana **Sesso:** Maschile

Stato Civile: Coniugato con tre figlie

Numero di telefono: (+39) 09039762218 (Lavoro) e-mail: franz.saija@cnr.it

Indirizzo: V. le F. Stagno d'Alcontres, 98158, Messina, Italia (Lavoro)

Sito web: <https://publications.cnr.it/authors/franz.saija>

ESPERIENZA LAVORATIVA

01/01/2023 – ATTUALE Messina, Italia

PRIMO RICERCATORE - ISTITUTO PER I PROCESSI CHIMICO-FISICI DEL CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE

01/01/2001 – 31/12/2022 Messina, Italia

RICERCATORE - ISTITUTO PER I PROCESSI CHIMICO-FISICI DEL CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE

01/01/1999 – 01/01/2000 Bruxelles, Belgio

POST-DOC - UNITÀ DI FISICA DEI POLIMERI, UNIVERSITÀ DI BRUXELLES

01/02/1997 – 31/12/1998 Messina, Italia

BORSA DI STUDIO - ISTITUTO DI TECNICHE SPETTROSCOPICHE DEL CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE

01/11/1995 – 31/01/1997 Messina, Italia

BORSA DI STUDIO - ISTITUTO NAZIONALE PER LA FISICA DELLA MATERIA (UNITÀ DI RICERCA DI MESSINA)

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

01/11/1992 – 31/10/1995 Messina, Italia

DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA - Università degli Studi di Messina

01/11/1987 – 20/07/1992 Messina, Italia

LAUREA IN FISICA - Università degli Studi di Messina

09/1982 – 07/1987 Messina

DIPLOMA SCIENTIFICO - Liceo Scientifico "G. Seguenza", Messina

ABILITAZIONI SCIENTIFICHE NAZIONALI

10/04/2017 – 10/04/2028

Abilitazione Scientifica - Professore Ordinario - settore concorsuale 02/B2 (Fisica Teorica della Materia)

05/04/2018 – 05/04/2029

Abilitazione Scientifica - Professore Ordinario - settore concorsuale 03/A2 (Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche)

26/07/2018 – 26/07/2029

Abilitazione Scientifica - Professore Associato - settore concorsuale 02/B1 (Fisica Sperimentale della Materia)

PREMI

- 1992 Vincitore di una borsa di studio della Fondazione “Uberto Bonino e Maria Sofia Pulejo” per trascorrere un periodo di sei mesi presso il Dipartimento di Fisica Teorica dell’Università degli Studi di Trieste;
- Premio “Incentivazione al Personale CNR – Anno 2005”;
- Premio “Giordano Bruno 2016” dell’Accademia Internazionale “Amici della Sapienza

ATTIVITÀ DIDATTICA E DI FORMAZIONE

- Cultore della materia nel settore scientifico disciplinare FIS/07 (Fisica Applicata) presso l’Università degli Studi di Messina;
- Cultore della materia nel settore scientifico disciplinare FIS/03 (Fisica della Materia) presso l’Università degli Studi di Messina;
- Correlatore esterno di diverse tesi sia triennali sia magistrali per la laurea in Fisica o Chimica presso l’Università degli Studi di Messina;
- Tutor e Supervisore di Tirocini e Borse di Studio;
- Componente del Collegio dei Docenti del Dottorato di Ricerca in Fisica dell’Università degli Studi di Messina dal XXIV ciclo (anno 2008);
- Docente di moduli di insegnamento per il Dottorato di Ricerca in Fisica;
- Docente a contratto di Fondamenti di Informatica;
- Componente di commissioni per l’assegnazione di assegni di ricerca e borse di studio;
- Componente della Commissione giudicatrice del Concorso per l’ammissione al Dottorato di Ricerca in Fisica, XXV ciclo, nominata con D.R. n. 3234 del 07/10/2009.

ATTIVITÀ DI VALUTAZIONE

- Valutatore esterno di tesi di master, dottorato e progetti di ricerca della National Research Foundation (NRF-Sud Africa);
- Valutatore dell'EDGE Fellowship (<https://inomics.com/institution/1297768>) Marie Skłodowska-Curie Actions (Irlanda);
- Valutatore di progetti di ricerca del National Science Centre (<https://www.ncn.gov.pl/en/>), Polonia;
- Valutatore del Panel Scientifico del CINECA;
- Revisore per la VQR (Valutazione Qualità Ricerca) – MIUR;
- Componente del GEV 2 (Fisica) dell'ANVUR per la VQR 2020-24

INCARICHI SCIENTIFICI E PROFESSIONALI

- Componente del Consiglio Scientifico dell'Istituto per i Processi Chimico-Fisici del CNR dall'anno 2008 al 2020;
- Componente del CNR Open Science Task Force;
- Componente Ufficio “Outreach e Comunicazione” dell'IPCF;
- Responsabile dell'Unità di Calcolo Scientifico dell'IPCF (Messina);
- Coordinatore Scientifico dell'Accordo di Cooperazione Scientifica fra CNR-IPCF/CAS-IBP(Praga);
- Coordinatore Scientifico dell'accordo bilaterale fra l'Istituto per i processi Chimico-Fisici del CNR e l'Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie - Faculté de Sciences et Ingénierie de Sorbonne Université di Parigi;
- Referente del Laboratorio di Fisica Computazionale della Materia (Messina) della Rete Nazionale dei Laboratori di Astrobiologia (ASTROBioLAB): <https://astrobiologia.weebly.com/teams.html>;
- Membro del Comitato Direttivo della Società Italiana di Astrobiologia: <https://astrobiologia.weebly.com/comitato-direttivo.html>;
- Presidente del Consiglio Scientifico della Società Italiana di Astrobiologia: <https://astrobiologia.weebly.com/comitato-scientifico.html>.

APPARTENENZA AD ACCADEMIE E SOCIETÀ SCIENTIFICHE

- Socio aggregato dell'Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, Università degli Studi di Messina (<https://www.accademiapeloritana.it/>);
- Socio della Società Italiana di Fisica (S.I.F.);
- Socio della Società Italiana di Astrobiologia (<https://astrobiologia.weebly.com/>).

ORGANIZZAZIONE DI EVENTI

- Membro del Comitato Organizzatore Locale della scuola NATO-ASI "New approaches to old and new problems in liquid state theory: inhomogeneities and phase separation in simple, complex and quantum fluids", Patti (Messina) dal 7 al 17 Luglio 1998;
- Coordinatore per l'IPCF della sede di Messina della manifestazione "La Notte del Ricercatore" organizzata dall'Università di Messina per il quadriennio 2006-2009;
- Membro del Comitato Organizzatore e Scientifico del Ciclo di Seminari "Appunti di Fisica";
- Membro del Comitato organizzatore e Scientifico del Workshop: "Appunti di Fisica Teorica" che si svolge con cadenza annuale presso la sede dell'IPCF di Messina;
- FisMat2015 (Palermo, 28 settembre – 2 ottobre 2015); Chairman della sessione parallela: "Molecular liquids in equilibrium and non-equilibrium regimes";
- Membro del Comitato Organizzatore e Scientifico del Congresso: "IPCF 2015" (Sant'Alessio Siculo, Messina, 4 ottobre – 6 ottobre, 2015);
- Membro del Comitato Organizzatore e Scientifico del Congresso: "Atomistic simulations in prebiotic chemistry – a dialog between experiment and theory - CECAM" (Parigi, 20 – 22 giugno, 2016); <https://www.cecarn.org/workshop-details/371>;
- Membro del Comitato Organizzatore e Scientifico del Workshop: "L'altra metà del cielo. Le donne in astrofisica: ieri, oggi ... domani" svolto il 9 maggio 2018 a Messina;
- Membro del Comitato Organizzatore del Convegno: "Dalla Conoscenza alla Valorizzazione: il Ruolo dell'Archeometria nei Musei" svolto dal 27 al 29 Marzo 2019 a Reggio Calabria;
- Membro del Comitato Organizzatore e Scientifico del Congresso: "Atomistic simulations in prebiotic chemistry – a dialog between experiment and theory - CECAM" (Parigi, 1 – 3 luglio, 2019); <https://www.cecarn.org/workshop-details/101>;
- Chair e Membro del Comitato Organizzatore e Scientifico del Congresso: "Sulle tracce delle origini della vita: dal laboratorio all'esplorazione spaziale". Evento per il Centenario del CNR (Messina, 31 maggio, 2023);
- Membro del Comitato Organizzatore del Meeting: "IPCF Meeting". (Messina, 6 - 8 settembre, 2023); <https://www.ipcf.cnr.it/it/event/ipcf-meeting>;

Attività di valutazione per riviste scientifiche

Revisore (*referee*) per conto di riviste scientifiche internazionali, quali:

- APS (American Physical Society) PRL, PRE, PRB;
- ACS (American Chemical Society) JPCL, JPCB, Industrial & Engineering Chemistry Research;
- AIP (American Institute of Physics) JCP, Journal of Applied Physics D, AIP Advances;
- RSC (Royal Society of Chemistry) PCCP, Soft Matter;
- Elsevier (Journal of Molecular Liquids);
- Springer: Journal of Solution Chemistry, Central European Journal of Chemistry;
- Taylor & Francis: Molecular Physics, Physics & Chemistry of Liquids;

ATTIVITÀ DI EDITOR

- Editor per conto della Royal Society of Chemistry del volume dal titolo “Prebiotic Photochemistry: from Miller-Urey experiments to recent findings” della serie “Comprehensive Series in Photochemical and Photobiological Sciences”, June 2021;
- Editor per conto della MDPI (Applied Sciences) dello Special Issue: “Complexation of Metals in Natural Fluids: Simulations, Experiments and Applications”
- Membro dell’Editorial Board (Material Physics) della Rivista “Materials”; <https://www.mdpi.com/journal/materials/sectioneditors/Physics>
- Associate Editor della Rivista “Frontiers in Physics”, sezione “Physical Chemistry Chemical Physics”; <https://loop.frontiersin.org/people/2052839/overview>

COLLABORAZIONI

- Prof. A. M. Saitta, Institute of Mineralogy, Physics of Materials and Cosmochemistry (IMPMC), Sorbona, Parigi (Francia);
- Prof. Martin Ferus, Departmente of Spectroscopy, J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry (Repubblica Ceca);
- Prof. Jiri Sponer, Masaryk University, Brno, (Repubblica Ceca);
- Prof. Raffaele Saladino, Università della Tuscia, Viterbo (Italia);
- Prof A. Santos, Universidad de Extremadura, Badajoz (Spain);
- Prof. M. Lopez de Haro, Universidad Nacional Autonoma de Mexico, Temixco (Mexico);
- Prof. M. Pochylski, Division of Optics, Department of Physics, Adam Mickiewicz University (Polonia);
- Prof. P. Giaquinta, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Messina;
- Prof. G. Pastore, Dipartimento di Fisica Teorica, Università degli Studi di Trieste;
- Prof. J.-P. Ryckaert, Unité de Physique des Polymeres, Université Libre de Bruxelles (Belgio);
- Prof. R. Wheatley, Department of Chemistry, University of Nottingham (Regno Unito);
- Prof. Sergey A. Khrapak, Max-Planck-Institut für Extraterrestrische Physik, Garching (Germany).

PROGETTI SCIENTIFICI NEGLI ULTIMI 3 ANNI COME PI O CO-PI

Titolo del Progetto: EXOChemistry: Life as Universal Event

Anno inizio/Fine: 2023 - 2024

Finanziatore: Fondi INAF

Finanziamento Totale: 49.000 Euro

Titolo del Progetto: PRIN “Exo-planetary Cloudy Atmospheres and Stellar High energy (Exo-CASH)”

Anno inizio/fine: 2023 - 2025

Finanziatore: Fondi MUR

Finanziamento Totale: 251.590 Euro

Titolo del Progetto: Accordo Bilaterale CNR/CAS (Rep. Ceca) “Esplorazione dei meccanismi di sintesi prebiotica nei crateri da impatto”

Anno inizio/fine: 2022 - 2024

Finanziatore: Fondi CNR

Finanziamento Totale: 12.000 Euro

PARTECIPAZIONE A PROGETTI SCIENTIFICI

Titolo del Progetto: A statistical physics approach to disordered and complex systems - **AFESDeCo**

Anno inizio/fine: 2017/2021

Finanziatore: Ministry of Economy and Competitiveness, Spain

Finanziamento Totale: 263.800 Euro

Titolo del Progetto: PON “Ricerca e Competitività” 2007-2013, Avviso D.D. 713/Ric. del 29 ottobre 2010 – Asse I – Distretti di alta tecnologia e relative reti. TITOLO III – Creazione di nuovi Distretti e/o nuove aggregazioni Pubblico-Private “*Distretto di Alta Tecnologia per l’innovazione nel settore dei beni culturali della Regione Sicilia (DTBC)*” – **NEPTIS**

Anno inizio/fine: 2015/2017

Finanziatore: MIUR/Fondi Strutturali Europei

Finanziamento Totale: 3.782.685 Euro

Titolo del Progetto: PON “Ricerca e Competitività” 2007-2013, Avviso D.D. 713/Ric. del 29 ottobre 2010 – Asse I – Distretti di alta tecnologia e relative reti. TITOLO III – Creazione di nuovi Distretti e/o nuove aggregazioni Pubblico-Private “*Distretto di Alta Tecnologia per l’innovazione nel settore dei beni culturali della Regione Sicilia (DTBC)*” – **TECLA**

Anno inizio/fine: 2015/2017

Finanziatore: MIUR/Fondi Strutturali Europei

Finanziamento Totale: 4.548.699 Euro

Titolo del Progetto: PON “Ricerca e Competitività” 2007-2013, Avviso D.D. 84/Ric. Del 2 marzo 2012 – Asse II – Sostegno all’innovazione – Obiettivo Operativo – Azioni integrate per lo sviluppo sostenibile e per lo sviluppo della società dell’informazione – Azioni integrate per la società dell’informazione – Azioni integrate per lo sviluppo sostenibile

Anno inizio/fine: 2012/2015

Finanziatore: MIUR/Fondi Strutturali Europei

Finanziamento Totale: 29.718.389 Euro

Titolo del Progetto: POR FESR Sicilia 2007-2013 - Asse IV, Obiettivo Operativo 4.1.2 Linea di Intervento 4.1.2.A. Innovazione Tecnologica e di Processo per il settore manifatturiero – **INTEP**

Anno inizio/fine: 2012/2015

Finanziatore: Regione Sicilia

Finanziamento Totale: 10.609 Euro

Titolo del Progetto: PON “Ricerca e Competitività” 2007-2013, Avviso D.D. 713/Ric. del 29 ottobre 2010 – Asse I – Distretti di alta tecnologia e relative reti. TITOLO II – Sviluppo/potenziamento di Distretti ad Alta Tecnologia e di Laboratori pubblico/privati “*Valorizzazione Biomolecolare ed Energetica di biomasse residuali del settore Agroindustriale ed Ittico*” – **BIO4BIO**

Anno inizio/fine: 2012/2015
Finanziatore: MIUR/Fondi Strutturali Europei
Finanziamento Totale: 7.530.363 Euro

Titolo del Progetto: POR FESR Sicilia 2007-2013 Misura 4.1.1.1. Fotovoltaico di III° generazione: sviluppo di celle solari sensibilizzate con coloranti estratti da prodotti vegetali siciliani. - **SAGRO**
Anno inizio/fine: 2011/2014
Finanziatore: Regione Sicilia
Finanziamento Totale: 65.6591 Euro

Titolo del Progetto: PON “Ricerca e Competitività” 2007-2013, Avviso D.D. 84/Ric. Del 2 marzo 2012 – Asse II – Sostegno all’innovazione – Obiettivo Operativo – Azioni integrate per lo sviluppo sostenibile e per lo sviluppo della società dell’informazione – Azioni integrate per la società dell’informazione – Azioni integrate per lo sviluppo sostenibile **CLUSTER DICET – INMOTO – OR.C.HE.S.T.R.A.**
Anno inizio/fine: 2012/2015
Finanziatore: MIUR/Fondi Strutturali Europei
Finanziamento Totale: 20.830.995 Euro

Titolo del Progetto: Studio ed analisi sperimentale sul comportamento reologico con campi non omogenei
Anno inizio/fine: 2010
Finanziatore: Ministero della Difesa; Signo Motus Srl
Finanziamento Totale: 20.000 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 2006
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento Totale: 3.254 Euro

Titolo del Progetto: *POR 2000-2006 Misura 3.15* sottoazione C “Potenziamento delle infrastrutture e laboratori esistenti”. Progetto Tecnologie sensoristiche e sistemi automatici intelligenti per l’innalzamento competitivo delle attività produttive.
Anno inizio/fine: 2004/2008
Finanziatore: Fondi Strutturali P.O.R
Finanziamento Totale: 360.000 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 2005
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento Totale: 5.740 Euro

Titolo del Progetto: Potenziamento delle reti di ricerca nelle aree depresse. Delibere CIPE 29 Dicembre 1995, 8 Agosto 1996, 28 Agosto 1997. Cluster 26 Materiali Innovativi. Metodologie e diagnostiche per materiali e ambiente.

Anno inizio/fine: 2000/2004
Finanziamento Totale: 198.000 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 2004
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento Totale: 7.367 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 2003
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento Totale: 6.380 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 2002
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento Totale: 13.225 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 2001
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento Totale: 10.222 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 2000
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento Totale: 6.334 Euro

Titolo del Progetto: Progetto Materiali, Processi e Dispositivi per Sensoristica Optoelettronica ed Elettronica di Potenza - (FESR N°94.05.09.013/ ARINCO N°94.IT.16.028)
Sottoprogramma II "Ricerca e Innovazione Misura II.1" Centri di Ricerca e Innovazione I Programma Operativo MURST - CNR.
Anno inizio/fine: 1994/1999
Finanziatore: FESR
Finanziamento: 560.000 Euro

Titolo del Progetto: Progetto di Ricerca di Ateneo: Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
Anno inizio/fine: 1999
Finanziatore: Università degli Studi di Messina
Finanziamento: 6.628 Euro

Titolo del Progetto: New routes to understanding polymer materials using experiments and realistic modeling – (**Contract No. :** ERB-FMRX-CT98-0176)

<https://cordis.europa.eu/project/id/FMRX980176>

Anno inizio/fine: 1998 - 2002

Finanziatore: Comunità Europea (EU)

Finanziamento Totale: 1.339.000 Euro

PARTECIPAZIONI E COMUNICAZIONI A SCUOLE E CONVEGNI

(Più di 30 comunicazioni a congresso)

1. *Workshop on the Liquid State Matter: Opportunities from New Radiation Sources*, Centro Internazionale di Fisica Teorica , Trieste, Italia (19 – 29 Luglio, 1993).
2. *Quarta Scuola Nazionale di Fisica della Materia*, Torino, Italia (2 – 14 Ottobre, 1993)
3. *XIII Convegno di Fisica Teorica e Struttura della Materia*, Fai della Paganella (TN), Italia (6 – 10 Aprile, 1994). Poster: “Ordine ed Entropia in una Miscela Binaria di Sfere Rigide”
4. *Quinta Scuola Nazionale di Fisica della Materia*, Torino, Italia- 15 Settembre, 1994)
5. *Sesta Scuola Nazionale di Fisica della Materia*, Torino, Italia (2 – 12 Ottobre, 1995)
6. *Workshop on Equilibrium Structures and Phase Transitions in Mesoscopic Dispersions*, Pisa, Italia (20 - 21 Ottobre 1995).
7. *XV Convegno di Fisica Teorica e Struttura della Materia*, Fai della Paganella (TN), Italia (30 Marzo – 2 Aprile, 1996). Poster: "Miscele binarie di sfere rigide: proprietà strutturali a bassa densità".
8. *Advances in the Computer Simulations of Liquid Crystals*, NATO-ASI, Erice (TP), Italia (11 – 21 Giugno 1998). Poster: “Entropy and Orientational Order in a Fluid of Hard Spherocylinders”.
9. *New approaches to old and new problems in liquid state theory: inhomogeneities and phase separation in simple, complex and quantum fluids*, NATO-ASI, Patti Marina (ME), Italia (7 – 17 Luglio 1998). Poster: “Fluid-Fluid separation in non-additive hard sphere mixtures: A study of the statistical entropy”. Componente del *Local Organizing Committee*
10. *TMR Meeting; NEWRUP (New Routes for Understanding Polymers)*, Mainz, Germania (11 - 13 Febbraio 1999).
11. *TMR Meeting; NEWRUP (New Routes for Understanding Polymers)*, Patras, Grecia (4 - 7 Giugno 1999). Comunicazione orale: F. Saija, “Molecular Dynamics of an oligomer of Polyisobutylene”.
12. *TMR Meeting; NEWRUP (New Routes for Understanding Polymers)*, Bruxelles, Belgio (20 - 22 Dicembre 1999). Comunicazione orale: F. Saija, “Preliminary results on the local dynamics of Polyisobutylene”.
13. *TMR Meeting; NEWRUP (New Routes for Understanding Polymers)*, Edinburgh, Regno Unito (7 – 9 Gennaio 2001).
14. *Scaling Concepts and Complex Systems*, Merida, Yucatan, Mexico (9-14 Luglio 2001). Poster: “Fluid-fluid separation in asymmetric nonadditive mixtures”.
15. *XII Convegno Nazionale della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica (SISN)* , Milazzo, Italia, (8-10 Novembre 2001).
16. *XIII Convegno Nazionale della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica (SISN)* , Bonn, Germania, (15 Maggio 2002).

17. *ESS European Conference* , Bonn, Germania, (16 – 17 Maggio 2002).
 - a. Poster: “Microgel structure of graft polymer solutions investigated by small angle neutron scattering”;
 - b. Poster: “Chain mobility and ionic diffusion in polymer-salt complexes”.
18. *INFM Meeting 2002* , Bari, Italia, (24 – 28 Giugno 2002). Poster: “Ordering in a fluid of hard spherocylinders: An entropy-based approach”
19. *Computational models for liquid crystals and complex systems – A CECAM Workshop*, Erice (TP), Italia, (13 – 18 Luglio 2002). Poster: “Ordering in a fluid of hard spherocylinders: An entropy-based approach”
20. *Thermodynamics and Statistical Mechanics with industrial applications* , Cambridge, Regno Unito, (9 – 11 Aprile 2003). Comunicazione Orale: D. Costa, F. SAIJA, P. V. Giaquinta “Entropy and Correlations in a Fluid of Aligned Spherocylinders: The Onset of Smectic Order”
21. *INFM Meeting 2004* , Genova, Italia, (8 – 10 Giugno 2004).
 - a. Comunicazione orale: M. Pieruccini, F. SAIJA “Lattice model for molecular aggregation and correlation in monohydric lower alcohols: Application to the dielectric investigations”;
 - b. Comunicazione orale: D. Costa, F. SAIJA, P. V. Giaquinta, “Phase transitions in model liquid crystals: An entropy-based Monte Carlo study”;
 - c. Poster: “Brillouin scattering investigations in methanol/CCl₄ mixture: roles of homogeneous and heterogeneous aggregations”;
 - d. Poster: “Brillouin scattering investigations on linear alcohol/CCl₄ mixtures”.
22. *Einstein e la Relatività cento anni dopo* , Messina, Italia, (3 – 5 Marzo 2005). Comunicazione Orale: F. Saija, “Albert Einstein e il moto Browniano”.
23. *MMD Meeting – Matter, Materials and Devices*, Genova, Italia, (22 – 25 Giugno 2005). Poster: “Thermodynamic stability of the fluid-fluid phase separation in binary athermal mixtures”.
24. *6th Liquid Matter Conference*, Utrecht, Olanda, (2 – 6 Luglio 2005).
 - a. Poster: “High-pressure phase diagram of the exp-6 model: The case of Xe”;
 - b. Poster: “Phase diagram of the Gaussian-core model”.
25. *Symposium in honour of Prof. Michelle Parrinello on the Occasion of his 60th Birthday*, Monte Verità – Ascona, Svizzera (6 – 7 Settembre 2005). Comunicazione Orale: P. V. Giaquinta, R. Esposito, F. SAIJA, A. M. Saitta, “Entropy-based measure of structural order in water”.
26. *XCI Congresso Nazionale Società Italiana di Fisica*, Catania, Italia (26 Settembre – 1 Ottobre 2005).
 - a. Comunicazione Orale: F. SAIJA, S. Prestipino, P. V. Giaquinta, “High-pressure phase diagram of the exp-6 model: the case of Xenon”.
 - b. Comunicazione Orale: S. Prestipino, F. SAIJA, P. V. Giaquinta, “Phase diagram of the Gaussian-core model”.
27. *Liquid Systems under Extreme Conditions EMLG/JMLG Annual Meeting*, Barcelona, Spain (3 – 7 Settembre 2006).
 - a. Comunicazione orale: F. SAIJA, A. M. Saitta, P. V. Giaquinta, T. Strassle, S. Klotz, “Structural anomalies in water: An entropy-based approach”;
 - b. Poster: “Liquid-liquid phase transition in nonadditive model of binary athermal mixtures”;
 - c. Poster: “Excess compressibility in binary liquid mixtures”.

28. *44th EHPRG International Conference*, Praga, Repubblica Ceca (4 – 8 Settembre 2006).
 - a. Comunicazione orale: “Structure, translational and orientational of amorphous ices”;
29. *Caos e complessità*, Messina, Italia (24 – 26 Luglio 2006).
30. *Appunti di Fisica Teorica, Una giornata con la Fisica Teorica a Messina*, Messina, Italia (1 febbraio 2007). Comunicazione orale: F. SAIJA, “Un approccio entropico alle anomalie strutturali dell’acqua”.
31. *Mandelbrot e la geometria frattale quaranta anni dopo*, Messina, Italia, (21 – 24 Marzo 2007).
32. *New directions in liquid state theory*, CECAM, Lione, Francia (2 – 4 Luglio 2007). Comunicazione orale: D. Costa, G. Munaò, F. SAIJA, C. Caccamo “RISM theory and Molecular Dynamics study of structure and thermodynamics of liquid methanol”.
33. *Fluid phase behaviour and critical phenomena from liquid state theories and simulations*, CECAM, Lione, Francia (5 – 7 Luglio 2007). Comunicazione orale: G. Pellicane, F. SAIJA, C. Caccamo, P. V. Giaquinta, “Phase diagram of binary, athermal mixtures: theoretical and simulation results”.
34. *XX Congresso Nazionale GNSR 2007*, Catania, Italia (27 – 29 Giugno 2007). Comunicazione orale: F. Aliotta, F. SAIJA, R. Ponterio, “Excess thermodynamics properties in liquid binary mixtures”.
35. *SOCOBIM 2007, Soft, Complex and Biological Matter Conference*, Terrasini, Palermo, Italia (15 – 19 Luglio 2007).
 - a. Poster: “Excess thermodynamic properties in mixtures of room temperature ionic liquid and acetonitrile”;
 - b. Poster: “Phase diagram of binary athermal mixtures”;
 - c. Poster: “A Gaussian-core interaction for a liquid-crystal model”.
36. *Thermodynamics 2007*, Rueil-Malmaison, Francia (26 – 28 Settembre 2007). Comunicazione orale: F. Aliotta, R. Ponterio, F. SAIJA, “On the origin of excess thermodynamic quantities in liquid mixtures”.
37. *Grid Open Days all’Università di Palermo*, Palermo, Italia (6 – 7 Dicembre 2007). Comunicazione orale: D. Costa, G. Munaò, F. SAIJA, C. Caccamo, “Structural properties of methanol and carbon tetrachloride mixtures: A molecular dynamics study”.
38. *7th Liquid Matter Conference*, Lund, Svezia (27 Giugno – 1 Luglio 2008).
 - a. Poster: “A novel structural approach to the study of order in a molecular fluid”;
 - b. Poster: “Theory a simulation of methanol and carbon tetrachloride mixtures”.
39. *Understanding salvation from liquid to supercritical conditions – EMLG/JMLG*, Lisbona, Portogallo (31 Agosto – 4 Settembre 2008). Poster: F. Aliotta, M. G. Giorgini, F. SAIJA, “Brillouin scattering investigations of liquid crystal ME6N/CCl₄ mixtures”.
40. *Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids*, Taormina, Italia (22 – 26 Novembre 2008). Comunicazione orale: G. Malescio, F. SAIJA, S. Prestipino, “Anomalous melting behavior under extreme conditions: hard matter turning “soft””.
41. *Intermolecular Interactions and Liquid Structure – EMLG/JMLG*, Salisburgo, Austria (6 – 10 Settembre 2009). Comunicazione su invito: F. Aliotta, R. Ponterio, F. SAIJA, J. Gapiński, M. Polchylski, and Z. Blaszcak, “Relaxation Dynamics and Evidence of Scaling Behaviours in Aqueous Polymer Solutions”.
42. *Convegno Italiano sulla Materia ad Alta Pressione*, Roma, Italia (4 - 5 febbraio 2010). Comunicazione orale: F. SAIJA, “La fusione anomala degli elementi chimici ad alta pressione”.

43. *International Soft Matter Conference*, Granada, Spagna (5 - 8 Luglio 2010). Poster: S. Prestipino, F. SAIJA, G. Malescio “Minimal recipe for waterlike anomalies”.
44. *XCVI Congresso Nazionale Società Italiana di Fisica*, Bologna, Italia (20 - 24 Settembre 2010). Comunicazione Orale: F. SAIJA, S. Prestipino, G. Malescio, “Anomalous phase behavior in a model fluid with a single repulsive length scale”.
45. *1° Giornata di Studio del Dottorato di Ricerca in Fisica*, Messina, Italia (10 Novembre 2010). Comunicazione Orale: F. SAIJA, “IPCF-CNR: Research Laboratories of Messina”.
46. *Appunti di Fisica Teorica, Una giornata con la Fisica Teorica a Messina*, Messina, Italia (19 maggio 2011). Comunicazione orale: F. SAIJA, “Fusione anomala e anomalie water-like: indicazioni provenienti dallo studio di modelli classici”.
47. *8th Liquid Matter Conference*, Wien, Austria (6 – 10 Settembre 2011).
 - a. Poster: “Hexatic Phase in the two-dimensional Gaussian-core model”;
 - b. Poster: “Hyperacoustic relaxations in liquids: a comparison of renormalized damped oscillator and generalized hydrodynamics approaches”.
48. *Frontiers in statistical physics and complex systems*, Catania, Italy (2 – 5 Giugno 2012).
49. *7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems*, Barcelona, Spagna (21 – 26 Luglio 2013).
 - a. Comunicazione Orale: F. Aliotta, F. Saija, R. C. Ponterio, C. Vasi, P. V. Giaquinta, S. Prestipino, M. Pochylski “Irreversible freezing of water under isenthalpic conditions”;
 - b. Comunicazione Orale: A.M. Saitta, F. Saija, P.V. Giaquinta “Dissociation and proton-hopping conduction in water under electric field”.
50. *International Soft Matter Conference 2013*, Rome, Italia (15 – 19 Settembre 2013).
 - a. Comunicazione Orale: F. Aliotta, P. V. Giaquinta, M. Pochylski, R.C. Ponterio, S. Prestipino, F. Saija, C. Vasi “Adiabatic freezing and nucleation rates in supercooled water”.
51. *WaterEurope 2013*, Zaragoza, Spagna (12 – 14 Giugno 2014).
 - a. Comunicazione Orale: F. Aliotta, P. V. Giaquinta, R.C. Ponterio, S. Prestipino, F. Saija, C. Vasi “Supercooled water escaping metastability”.
 - b. Comunicazione Orale: A.M. Saitta, F. Saija, G. Cassone, P. V. Giaquinta, M. Degrada, M. Casula, S. Sorella, F. Mauri “Water Dissociation and proton-hopping: DFT and beyond”.
 - c. Poster: G. Cassone, P. V. Giaquinta, F. Saija, A. M. Saitta “Ab initio Molecular Dynamics study of proton conduction in water ices under an electric field”.
52. *9th Liquid Matter Conference*, Lisbon, Portugal (21 – 25 Luglio 2014).
 - a. Poster: “Virial coefficients and demixing in the Asakura-Oosawa model”.
53. *Knowledge Integration for Advanced & Sustainable Systems 2014*, Rome, Italia (10 Novembre 2014).
 - a. Invited: F. Saija, “Effetto di campi elettrici nell’esperimento di Miller: uno studio da principi primi”.
54. *Goldschmidt 2015 25th Anniversary*, Prague, Czech Republic (16 – 21 Agosto 2015). Comunicazione orale: A. M. Saitta, F. Saija, F. Pietrucci, S. Laporte, F. Finocchi, F. Guyot “Ab-initio prebiotic chemistry: Miller-like experiments and beyond”.
55. *Electroporation and Pulsed Electric Fields 2015*, Portoroz, Slovenia (6 – 10 Settembre 2015). Comunicazione orale: A. M. Saitta, F. Saija, G. Cassone, S. Laporte, F. Pietrucci, F. Finocchi, F. Guyot “Electric-field-induced chemistry: water, solutions, prebiotic and

- beyond”.
56. *From trajectories to reaction coordinates: making sense of molecular data - CECAM*, Vienna, Austria (16 – 18 Settembre 2015). Comunicazione orale: A. M. Saitta, F. Saija, F. Pietrucci, F. Guyot “Miller Experiments in Atomistic Computer Simulations”.
 57. *XX Congreso de Física Estadística*, Badajoz, Spagna (5 – 7 Ottobre 2015).
 - a. Poster: A. Santos, M. Lopez de Haro, G. Fiumara, F. Saija “Non-pairwise effective colloid interactions in the Asakura-Oosawa model”.
 58. *Italian National Conference on Condensed Matter Physics – FisMat2015*, Palermo, Italia (28 Settembre – 2 Ottobre, 2015).
 - a. Comunicazione orale: A. M. Saitta, F. Saija, G. Cassone, P. V. Giaquinta, F. Pietrucci, F. Guyot “Liquid under electric fields: from water dissociation to Miller-like experiments”;
 - b. Comunicazione orale: F. Aliotta, P. V. Giaquinta, R. C. Ponterio, S. Prestipino, F. Saija, C. Vasi “Recalescence from supercooled water”;
 - c. Comunicazione orale: G. Cassone, P. V. Giaquinta, F. Saija, A. M. Saitta “Proton transfer in liquid methanol”;
 59. *Atomistic simulations in prebiotic chemistry – a dialog between experiment and theory - CECAM*, Parigi, Francia (20 – 22 Giugno 2016). Comunicazione orale: G. Cassone, J. E. Sponer, E. Di Mauro, F. Saija, A. M. Saitta, J. Sponer “Temperature dependence of the relative stability of 2’, 3’ and 3’, 5’ cyclic nucleotides from Born-Oppenheimer Molecular Dynamics Simulations”.
 60. *NIM Conference on Molecular Origins of Life*, Monaco, Germania (15 – 16 Settembre 2016). Comunicazione orale: A. M. Saitta, F. Pietrucci, F. Saija, S. Laporte, F. Guyot “Prebiotic chemistry from advanced ab initio method”.
 61. *Materials Science and Technology – Materials.it 2016*, Catania, Italia (12 – 16 Dicembre 2016).
 - a. Comunicazione orale: V. Mollica Nardo, R. C. Ponterio, F. Saija, S. Trusso, “SERS study on organic pigments: comparison between DFT calculations and experimental data”;
 - b. Comunicazione orale: G. Munaò, F. Saija, “Density and structural anomalies in soft-repulsive dimeric fluids”;
 - c. Comunicazione orale: G. Cassone, F. Saija, P. V. Giaquinta, A. M. Saitta “Ab initio molecular dynamics study of aqueous solutions under an electric field”.
 62. *Entropy 2018 – From Physics to Information Sciences and Geometry*, Barcelona, Spagna (14 – 16 Maggio 2018). Comunicazione Orale: A. Santos, F. Saija, P. V. Giaquinta, “Residual Multiparticle Entropy for a Fractal Fluid of Hard Spheres.”
 63. *DSCTM Conferenza di Dipartimento*, Assisi, Italia (24 – 26 Settembre 2018).
 - a. Poster: F. Giacobello, G. Cassone, D. Chillé, C. Foti, O. Giuffré, V. Mollica Nardo, R. C. Ponterio, F. Saija, S. Trusso, “DFT calculations and Raman spectroscopy of As(III) complexation with thiol ligands”;
 - b. Poster: V. Mollica Nardo, F. Giacobello, R. C. Ponterio, V. Renda, F. Saija, A. Sinopoli, S. Trusso, “SERS substrates for pigments detection in works of art: a combined DFT and experimental study”.
 64. *Da Angelo Secchi alla spettroscopia moderna: un viaggio dalle stele al nanomondo*, Reggio Calabria, Italia, (18 – 19 Dicembre 2018). Comunicazione su invito: F. Saija, “L’origine della vita: dal’inorganico all’organico”.
 65. *Convegno Tematico AIAR 2019 Dalla Conoscenza alla Valorizzazione: il Ruolo*

- dell'Archeometria nei Musei*, Reggio Calabria, Italia (27 – 29 Marzo 2019).
- a. Poster: F. Giacobello, V. Mollica Nardo, C. Di Giacomo, G. Anastasio, M. L. Saladino, G. Lupò, M. F. Alberghina, S. Schiavone, F. Saija, R. C. Ponterio “San Gregorio polyptych by Antonello da Messina: a diagnostic campaign on the artwork conservation”.
66. *AIV XXIV Conference*, Giardini Naxos, Italia (07 – 10 Maggio 2019).
- a. Comunicazione orale: V. Mollica Nardo, A. Sinopoli, L. Kabalan, R. C. Ponterio, F. Saija, S. Trusso, “SERS and DFT study of indigo adsorbed on silver nanostructured surface”.
67. *Water under Extreme Conditions*, Roma Tre, Italia (12 – 14 Giugno 2019).
- a. Comunicazione orale: G. Cassone, J. Sponer, S. Trusso, F. Saija, “Ab initio spectroscopy of water under electric field”.
68. *DSCTM Conferenza di Dipartimento*, Bressanone, Italia (28 – 30 Ottobre 2019).
- a. Poster: F. Saija, G. Cassone, C. Cecchi-Pestellini, F. Pietrucci, A. M. Saitta, J. Sponer, J. E. Sponer, “Computational Approach to Prebiotic Chemistry”;
 - b. Poster: G. Cassone, J. Sponer, S. Trusso, F. Saija, “Ab initio Spectroscopy of Water under Electric Field”.
 - c. Poster: V. Mollica Nardo, G. Cassone, R. C. Ponterio, S. Trusso, F. Saija, “Influence of External Electric Field on Raman Spectra of Indigo: An *ab initio* Study”.
69. *1st Italian Space Agency Workshop on Astrobiology*, online (27 – 29 Ottobre 2020).
<https://astrobio2020.wixsite.com/asiworkshop>
- a. Comunicazione orale: G. Cassone, F. Saija, “Advanced computational approaches in astrochemistry”.
70. *Ariel-It Science*, online (18 – 21 Maggio 2021).
<https://indico.ict.inaf.it/event/1466/>
- a. Comunicazione orale: G. Cassone, F. Saija, “Advanced computational approaches in astrochemistry”.
71. *1st Life and Space Agency 21*, online (29 Settembre – 1 Ottobre 2021).
<https://astrobio.pl/life-and-space-2021>
- a. Comunicazione orale: G. Cassone, F. Saija, “Advanced computational approaches in astrochemistry”.
72. *Ariel-It Science*, online (25 – 27 Maggio 2022).
<https://indico.ict.inaf.it/event/1997/>
73. *WaterX@2022 - Water under Extreme Conditions*, La Maddalena, Olbia, Italia (28 Maggio – 2 Giugno 2022).
- a. Comunicazione orale: G. Cassone, F. Saija, S. Trusso, “Ab initio spectroscopy of water and influence of Nuclear Quantum Effects on water dissociation and proton transfer under electric field”.
74. *4th International Conference NanoPlasm2022*, Cetraro, Cosenza, Italia (13 – 17 Giugno 2022).
- a. Poster: K. Abid, A. Foti, R. Zribi, D. Spadaro, M. G. Donato, D. Bronte-Cirizia, A. Magazzù, F. Saija, G. Cassone, R. Ponterio, S. Trusso, O. M. Maragò, G. Neri, P. G. Gucciadi, “Photo Induced Enhanced Raman Scattering on hybrid 2D-MoS₂@Au Nanoparticles substrates”;
75. *EuroPlanet Science Congress*, Granada, Spain (18 – 23 Settembre 2022).
- a. Poster: M. Ferus, G. Cassone, P. Rimmer, F. Saija, K. Mrazikova, A. Knizek, S.

- Civis “Abiotic chemical routes towards the phosphine synthesis in the atmosphere of Venus”.
76. *Biennial European Astrobiology Conference (BEACON)*, La Palma, Spain (8 – 12 Maggio 2023).
- a. Poster: M. Ferus, K. Mrazikova, G. Cassone, P. Rimmer, F. Saija, H. Saeidfirozeh, A. Knizek, S. Civis “Theoretical investigation of phosphine synthesis over acidic in dust Venus atmosphere”.
77. *Ariel-It Science* (16 – 18 Maggio 2023), Palermo, Italia (16 – 18 Maggio 2023).
- a. Comunicazione orale: F. Saija, “Quantum-mechanical investigation of phosphine synthesis in Venus atmosphere”.
78. *VII Congresso della Società Italiana di Astrobiologia*, Roma, Italia (12 – 15 Giugno 2023).
79. *J. Heyrovsky Institute opens the Gateway to the Universe*, Praga, Repubblica Ceca (21 Maggio 2024).

DATI BIBLIOMETRICI

Scopus Author ID: 6603726965

WoS Researcher ID: P-6578-2014

ORCID: 0000-0002-5970-9001

Google Scholar: <http://scholar.google.com/citations?user=ttidcFoAAAAJ&hl=fr>

Research Gate: https://www.researchgate.net/profile/Franz_Saija

COVER SU RIVISTE SCIENTIFICHE

(2014) *In this issue* della rivista *Proceedings of the National Academy of Sciences* “*Simulations of the Miller Experiments*” riferito all’articolo “*Miller experiments in atomistic computer simulations*”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111**(38) (2014) 13768, A. M. Saitta, **F. SAIJA** (*Corresponding Author*);

(2016) Premio “Giordano Bruno 2016” dell’Accademia Internazionale “Amici della Sapienza”;

(2018) Cover dell’articolo “*Synthesis of (D)-erythrose from glycolaldehyde aqueous solutions under electric field*”, *Chem. Comm.*, **54**(26) (2018) 3211, G. Cassone, J. Sponer, J. E. Sponer, F. Pietrucci, A. M. Saitta, **F. SAIJA** (*Corresponding Author*);

(2019) Cover dell’articolo “*Ab initio spectroscopy of water under electric field*”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **21**(38) (2019) 21169, G. Cassone, J. Sponer, S. Trusso, **F. SAIJA** (*Corresponding Author*);

(2020) Cover dell’articolo “*Enhanced conductivity of water at the electrified air-water interface: a DFT-MD characterization*”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**(19) (2020) 10438, <https://doi.org/10.1039/C9CP06970D>; F. Creazzo, S. Pezzotti, S. Bougueros, A. Serva, J. Sponer, **F. SAIJA**, G. Cassone, M. P. Gaigeot;

(2020) Cover dell’articolo “*Electric-field induced entropic effect in liquid water*”, *The Journal of Chem. Phys.*, **158**(18) (2023) 184501, <https://pubs.aip.org/aip/jcp/issue/158/18>, V. Conti Nibali, S. Maiti, **F. SAIJA**, M. Heyden, G. Cassone.

PUBBLICAZIONI SU RIVISTE NON JCR CON REFEREE

1. F. SAIJA, P. V. Giaquinta, “*L’espansione del viriale per una miscela binaria di sfere rigide*”, Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche Matematiche e Naturali, vol. LXXIV (Anno Accademico 1996), pag. 204 (2003).
2. D. Costa, F. SAIJA, G. Munaò, and C. Caccamo, “*Molecular Dynamics of Methanol and Carbon Tetrachloride Mixtures*”, Proceedings of the Symposium: “GRID Open Days at the University of Palermo”, Palermo 6 -7 December 2007, edited by Consorzio COMETA.
3. F. SAIJA, “*The Messina Unit of the Istituto per i Processi Chimico Fisici of Italian National Research Council: A Brief Overview*”, Activity Report 2010 – Dottorato di Ricerca in Fisica, Università degli Studi di Messina; ISSN 2038-5889, Lorenzo Torrisi Ed.
4. G. Cassone and F. SAIJA, “*L’uso del computer e l’origine della vita*”, SAPERE, Mar/Apr. 2020;
5. F. Giacobello, V. Mollica-Nardo, C. Foti, R. C. Ponterio, F. SAIJA, S. Trusso, J. Sponer, G. Cassone, O. Giuffrè, “*Hydrolysis of Al^{+3} in Aqueous Solutions: Experiments and AB Initio Simulations*”, Liquids 2 (2022) 26.

CONTRIBUTI A CAPITOLO DI LIBRO

- I. Niels Bohr – Scienziato e filosofo, a cura di G. Gembillo e G. Giordano: F. SAIJA “*I Contributi di Niels Bohr alla Fisica Nucleare*”, pag. 249-266. Armando Siciliano Editore (2004);
- II. Einstein e la relatività cent’anni dopo, a cura di A. Anselmo: F. SAIJA “*Albert Einstein e la realtà degli atomi*”, pag. 445-460. Armando Siciliano Editore (2007);
- III. In Correlations in Condensed Matter under Extreme Conditions: A tribute to Renato Pucci on the occasion of his 70th birthday. Ed. by Giuseppe G. N. Angilella and Antonino La Magna. Springer International Publishing. G. Cassone, F. SAIJA, A. M. Saitta, P. V. Giaquinta, “*Hydrogen-Bonded Systems Under Intense Electric Fields*” **16**, pp. 233–246 (2017). ISBN: 978-3-319-53664-4. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-53664-4_16;
- IV. In Many-body approaches at different scales: a tribute to N. H. March on the occasion of his 90th birthday. Ed. by G. G. N. Angilella and C. Amovilli. New York: Springer. F. Aliotta, R. C. Ponterio, F. SAIJA, P. V. Giaquinta, “*Kovacs effect and the relation between glasses and supercooled liquids*”, **12**, pag. 139-152 (2018). ISBN 978-3-319-72373-0. DOI https://doi.org/10.1007/978-3-319-72374-7_12;
- V. In Computational Approaches for Chemistry Under Extreme Conditions, Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics 28 Ed. by Nir Goldman, Springer Nature Switzerland AG 2019, G. Cassone, F. Pietrucci, F. SAIJA, A. M. Saitta, “*Free Energy Calculation of Electric Field-Induced Chemistry*”, **5**, pag. 95-126 (2019). ISBN: 978-3-030-05599-8. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-05600-1_5;
- VI. Prebiotic Photochemistry: From Urey-Miller-like Experiments to Recent Findings. Eds. F. SAIJA, G. Cassone, “*Preface*”, pag. 5 – 7 (2021). ISBN: 978-1-83916-177-3. DOI: <https://doi.org/10.1039/9781839164354-FP005>.

PUBBLICAZIONI SU RIVISTE JCR (Coautore di oltre 120 pubblicazioni su riviste indicizzate di cui **più della metà come Primo Autore, Autore Corrispondente/Team Leader**)

1. F. SAIJA, P. V. Giaquinta, G. Giunta and S. Prestipino Giarritta, “On entropy and ordering in a binary hard-sphere mixtures”, J. Phys.: Condens. Matter **6** (1994) 9853-9865.
2. **F. SAIJA, G. Fiumara, P. V. Giaquinta, “Fourth virial coefficient of hard-body mixtures in two and three dimensions”, Molec. Phys. **87** (1996), 991-998; *ibidem* **92** (1997) 1089.**
3. F. SAIJA, G. Fiumara, P. V. Giaquinta, “Fifth virial coefficient of hard-sphere mixture”, Molec. Phys. **89** (1996) 1181-1186.
4. F. SAIJA, P. V. Giaquinta, “Statistical entropy of a binary hard-sphere mixture: low-density limit”, J. Phys.: Condens. Matter **8** (1996) 8137-8144.
5. F. SAIJA, G. Fiumara, P. V. Giaquinta, “Fifth virial coefficient of a two component mixture of hard discs”, Molec. Phys. **90** (1997) 679-681.
6. D. Costa, F. SAIJA and P. V. Giaquinta, “Angular correlations and statistical entropy of hard-spherocylinders: The isotropic-nematic transition”, Chem. Phys. Lett. **283** (1998) 86-90.
7. F. SAIJA, G. Fiumara and P. V. Giaquinta, “Virial expansion of a non additive hard-sphere mixture”, J. Chem. Phys., **108** (1998) 9098-9101.
8. R. J. Wheatley, F. SAIJA and P. V. Giaquinta, “Fifth virial coefficient of hard sphere mixtures”, Molec. Phys., **94** (1998) 877-879.
9. F. SAIJA, G. Pastore and P. V. Giaquinta, “Entropy and fluid-fluid separation in non-additive hard-sphere mixtures”, J. Phys. Chem. B **102** (1998) 10368-10371.
10. F. SAIJA, S. Prestipino and P. V. Giaquinta, “Entropy, correlations and ordering in two dimensions”, J. Chem. Phys. **113** (2000) 2806-2813.
11. K. Karatasos, F. SAIJA and J.-P. Ryckaert, “Short length-scale dynamics of Polyisobutylene by Molecular Dynamics Simulations”, Physica B **301** (2001) 119-125.
12. F. SAIJA, S. Prestipino and P. V. Giaquinta, “Scaling of local density correlations in a fluid close to freezing”, J. Chem. Phys. **115** (2001) 7586-7591.
13. F. SAIJA and P. V. Giaquinta, “Entropy and Fluid-Fluid Separation in Nonadditive Hard-Sphere Mixtures: The Asymmetric Case”, J. Phys. Chem. B **106** (2002) 2035-2040.
14. F. SAIJA and P. V. Giaquinta, “Monte Carlo simulation and phase behavior of nonadditive hard-core mixtures in two dimensions”, J. Chem. Phys. **117** (2002) 5780-5784.
15. D. Costa, F. Micali, F. SAIJA and P. V. Giaquinta, “Entropy and correlations in a fluid of hard spherocylinders: The onset of nematic and smectic order”, J. Phys. Chem. B **106** (2002) 12297-12306.
16. F. Aliotta, G. Di Marco, R. C. Ponterio, F. SAIJA, C. Vasi, “Relaxation processes in Polymer-Salt complexes”, Colloid Polym Sci **281** (2003) 882-886.
17. D. Costa, F. SAIJA and P. V. Giaquinta, “Smectic ordering of parallel hard spherocylinders: An entropy-based Monte Carlo study”, J. Phys. Chem. B **107** (2003) 9514-9519.
18. F. SAIJA, A. M. Saitta and P. V. Giaquinta, “Statistical entropy and density maximum anomaly in liquid water”, J. Chem. Phys. (Communication) **119** (2003) 3587-3589.
19. M. Pieruccini, F. SAIJA, R. Ponterio, C. Vasi, “A ground level interpretation of the

- dielectric behavior of diluted alcohol-in-carbon tetrachloride mixture*", J. Chem. Phys. **119** (2003) 10771-10776.
20. M. Pieruccini, F. SAIJA, C. Vasi, M. Musso, "The role of association in the dielectric behaviour of methanol/carbon tetrachloride mixtures", Chem. Phys. Lett. **382** (2003) 523-527.
 21. M. Pieruccini and F. SAIJA, "A mean field analysis of the static dielectric behavior of linear lower alcohols", J. Chem. Phys. **121**(2004) 3191-3196.
 22. F. Aliotta, M. Musso, R. C. Ponterio, F. SAIJA, G. Salvato, "Evidence of heterogeneous aggregation in methanol/CCl₄ mixtures: a Brillouin scattering investigation", J. Phys. Chem. B **108** (2004) 12972-12977.
 23. S. Prestipino, F. SAIJA and P. V. Giaquinta, "**Phase diagram of the Gaussian-core model**", Phys. Rev. E (Rapid Communication) **71**(5) (2005) 050102R.
 24. P. V. Giaquinta and F. SAIJA, "Reentrant melting in the Gaussian-core model: The entropy imprint", Chem. Phys. Chem. (Communication) **6** (2005) 1768-1771.
 25. F. SAIJA and S. Prestipino, "High pressure phase diagram of an exp-6 fluid: The case of Xe", Phys. Rev. B **72**(2) (2005) 024113.
 26. S. Prestipino, F. SAIJA and P. V. Giaquinta, "**Phase diagram of softly repulsive systems: The Gaussian and inverse-power-law model potentials**", J. Chem. Phys. **123** (2005) 144110.
 27. G. Pellicane, F. SAIJA, C. Caccamo, and P. V. Giaquinta, "Thermodynamic stability of the fluid-fluid phase separation in binary athermal mixtures: the role of nonadditivity", J. Phys. Chem. B **110** (2006) 4359.
 28. R. Esposito, F. SAIJA, A. M. Saitta, and P. V. Giaquinta, "**Entropy-based measure of the structural order in water**", Phys. Rev. E (Rapid Communication) **73** (2006) 040502.
 29. F. SAIJA, S. Prestipino and P. V. Giaquinta, "**Evaluation of phenomenological one-phase criteria for the melting and freezing of softly repulsive particles**", J. Chem. Phys. **124** (2006) 244504.
 30. G. Pellicane, F. SAIJA, C. Caccamo, and P. V. Giaquinta, "Virial coefficients and demixing of athermal nonadditive mixtures", J. Phys. Chem. B **111** (2007) 4503.
 31. S. Prestipino and F. SAIJA, "Phase diagram of Gaussian-core nematics", J. Chem. Phys. **126** (2007) 194902.
 32. F. Aliotta, J. Gapinski, M. Pochylski, R. C. Ponterio, F. SAIJA, and G. Salvato, "Excess compressibility in binary liquid mixtures", J. Chem. Phys. **126** (2007) 224508.
 33. E. Giuffrè, F. SAIJA, "Melting line of Krypton in extreme thermodynamic regimes", Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche Matematiche e Naturali, ISSN 1825-1242, vol. LXXXV (2007); DOI: 10.1478/C1A0701001.
 34. F. Aliotta, R. C. Ponterio, F. SAIJA, G. Salvato, and A. Triolo, "Excess thermodynamic properties in mixtures of a representative room temperature ionic liquid and acetonitrile", J. Phys. Chem. B **111** (2007) 10202.
 35. D. Costa, G. Munaò, F. SAIJA, and C. Caccamo, "RISM and molecular dynamics study of structure and thermodynamics of methanol", J. Chem. Phys. **127** (2007) 224501. Selezionato per la pubblicazione sul Virtual Journal of Biological Physics Research, Issue del 15 Dicembre, 2007.
 36. M. Pieruccini, F. SAIJA, "A possible mechanism underlying the anomalous dielectric response in concentrated methanol-in-carbon tetrachloride mixtures", Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche Matematiche e Naturali,

ISSN 1825-1242, vol. LXXXV (2007); DOI: 10.1478/C1A0701002.

37. F. Aliotta, F. SAIJA, R. C. Ponterio, “*Excess thermodynamic properties in liquid binary mixtures*”, J. Raman Spectrosc. **39** (2008) 220.
38. F. SAIJA, “*An entropy-based approach to the freezing of the generalized gaussian model*”, J. Chem. Phys. **128** (2008) 136101.
39. F. Aliotta, R. C. Ponterio, F. SAIJA, “*On the origin of excess thermodynamic quantities in liquid mixtures*”, Oil & Gas Science and Technology-Revue de l'IFP **63** (2008) 353-361.
40. G. Malescio, F. SAIJA, and S. Prestipino, “*Anomalous melting behavior under extreme conditions: hard matter turning “soft”*”, J. Chem. Phys. **129** (2008) 241101.
41. F. SAIJA, “*Statistical Entropy and Clustering in Absence of Attractive Terms in the Interparticle Potential*”, Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche Matematiche e Naturali, ISSN 1825-1242, vol. LXXXVI; DOI: 10.1478/C1A0802002.
42. S. Prestipino, F. SAIJA, and G. Malescio, “*The zero-temperature phase diagram of soft-repulsive particle fluid*”, Soft Matter, **5** (2009) 2795.
43. F. SAIJA, S. Prestipino, and G. Malescio, “*Anomalous phase behavior of a soft-repulsive potential with a strictly monotonic force*”, Phys. Rev. E **80** (2009) 031502.
44. S. V. Buldyrev, G. Malescio, C. A. Angell, N. Giovambattista, S. Prestipino, F. SAIJA, H. E. Stanley, and L. Xu, “*Unusual phase behavior of one-component systems with two-scale isotropic interactions*”, J. Phys. Condens. Matter **21** (2009) 504106.
45. M. Pochylski, F. Aliotta, R. C. Ponterio, F. SAIJA, and J. Gapinski, “*Some evidences of scaling behavior in the relaxation dynamics of aqueous polymer solutions*”, J. Phys. Chem. B **114** (2010) 1614.
46. F. Aliotta, M. E. Fontanella, R. C. Ponterio, F. SAIJA, C. Vasi, “*A Raman scattering investigation of the water-bridge phenomenon: Some preliminary result*”, Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche Matematiche e Naturali, ISSN 1825-1242. Vol. LXXXVIII (2010); DOI: 10.1478/C1A1002001.
47. D. Costa, G. Munaò, F. SAIJA, and C. Caccamo, “*Simulation and Reference Interaction Site Model theory of methanol and carbon tetrachloride mixtures*”, J. Chem. Phys. **132** (2010) 084506.
48. E. Giuffrè, S. Prestipino, F. SAIJA, A. M. Saitta, and P. V. Giaquinta, “*Entropy from correlations in TIP4P water*”, J. Chem. Theory and Computation **6** (2010) 626.
49. F. Aliotta, M. G. Giorgini, R. Ponterio, and F. SAIJA, “*Brillouin scattering investigation of ME6N liquid crystal in CCl₄*”, J. Molec. Liq. **153** (2010) 67.
50. R. C. Ponterio, M. Pochylski, F. Aliotta, C. Vasi, M. E. Fontanella, and F. SAIJA, “*Raman scattering measurements on floating water-bridge*”, J. Phys. D: Appl. Phys. **43** (2010) 175405.
51. F. SAIJA, G. Malescio, and S. Prestipino, “*Re-entrant melting of the exp-6 fluid: the role of the repulsion softness*”, Physics and Chemistry of Liquids **48** (2010) 477.
52. F. SAIJA, F. Aliotta, M. E. Fontanella, M. Pochylski, G. Salvato, C. S. Vasi, R. C. Ponterio, “*An extended model of liquid bridging*”, J. Chem. Phys. **133** (2010) 081104. Selezionato per la pubblicazione sul Virtual Journal of Biological Physics Research, Issue del 1 Settembre, 2010.
53. S. Prestipino, F. SAIJA, and G. Malescio, “*Anomalous phase behavior in a model fluid with only one type of local structure*”, J. Chem. Phys. **133** (2010) 144504.
54. F. Aliotta, R. C. Ponterio, F. SAIJA, J. Gapinski, and M. Pochylski, “*Relaxation dynamics and evidence of scaling behaviours in aqueous polymer solutions*”, J. Molec. Liq. **159**

- (2011) 105.
55. S. Prestipino, F. SAIJA, and P. V. Giaquinta, “*Hexatic phase in the two-dimensional Gaussian-core model*”, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 235701.
 56. F. SAIJA, “*The fourth virial coefficient of a nonadditive hard-disc mixture*”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13** (2011) 11885.
 57. S. V. Khrapak and F. SAIJA, “*Application of phenomenological freezing and melting indicators to exp-6 and Gaussian core potentials*”, *Mol. Phys.* **109** (2011) 2417.
 58. G. Malescio and F. SAIJA, “*A Criterion for Anomalous Melting in Systems with Isotropic Interactions*” *J. Phys. Chem. B* **115** (2011) 14091.
 59. F. Aliotta, J. Gapinski, M. Pochylski, R. C. Ponterio, F. SAIJA, and C. Vasi, “*Collective acoustic modes in liquids: a comparison between the generalized hydrodynamics and the memory function approaches*”, *Phys. Rev. E* **84** (2011) 051202.
 60. G. Malescio, S. Prestipino, and F. SAIJA, “*Anomalous melting and solid polymorphism of a modified inverse-power potential*”, *Mol. Phys.* **109** (2011) 2837.
 61. A. M. Saitta, F. SAIJA, and P. V. Giaquinta, “*Ab-initio molecular dynamics study of dissociation of water under an electric field*”, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 207801.
 62. F. SAIJA, A. Santos, S. B. Yuste, M. L pez de Haro, “*Fourth virial coefficients of asymmetric nonadditive hard-disk mixtures*”, *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 184505.
 63. G. Malescio and F. SAIJA, “*Model interactions for liquid systems with tetrahedral local coordination*”, *Rivista del Nuovo Cimento* **035** (2012) 539.
 64. S. Prestipino, F. SAIJA, and P. V. Giaquinta, “*Hexatic phase and water-like anomalies in a two-dimensional fluid of particles with a weakly softened core*”, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 104503.
 65. F. Aliotta, M. Pochylski, R. C. Ponterio, F. SAIJA, G. Salvato, C. S. Vasi, “*Structure of bulk water from Raman measurements of supercooled pure liquid and LiCl solutions*”, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 134301.
 66. F. Aliotta, J. Gapinski, M. Pochylski, R. C. Ponterio, F. SAIJA, G. Salvato, and C. Vasi, “*High-frequency propagating density fluctuations in deeply supercooled water: Evidence of a single viscous relaxation*”, *Phys. Rev. E* **87** (2013) 022303.
 67. F. Aliotta, P. V. Giaquinta, M. Pochylski, R. C. Ponterio, S. Prestipino, F. SAIJA, and C. Vasi, “*Volume crossover in deeply supercooled water adiabatically freezing under isobaric conditions*”, *J. Chem. Phys.* **138** (2013) 184504.
 68. S. Prestipino, F. SAIJA, A. Sergi, and P. V. Giaquinta, “*Minimum-density anomaly and spatial ordering of softly repulsive particles in a narrow channel*”, *Soft Matter*, **9** (2013) 9876.
 69. G. Cassone, P. V. Giaquinta, F. SAIJA, A. M. Saitta, “*Proton Conduction in Water Ices under an Electric Field*”, *J. Phys. Chem. B* **118** (2014) 4419.
 70. A. M. Saitta, F. SAIJA, “*Miller experiments in atomistic computer simulations*”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** (2014) 13768.
 71. G. Cassone, P. V. Giaquinta, F. SAIJA, A. M. Saitta, “*Effect of Electric Field Orientation on the Mechanical and electrical Properties of Water Ices: An Ab-initio Study*”, *J. Phys. Chem. B* **118** (2014) 12717.
 72. S. Prestipino, F. SAIJA, “*Hexatic phase and cluster crystals of two-dimensional GEM4 spheres*”, *J. Chem. Phys.* **141** (2014) 184502.
 73. F. Aliotta, P. V. Giaquinta, R. C. Ponterio, S. Prestipino, F. SAIJA, G. Salvato, C. S. Vasi, “*Supercooled water escaping from metastability*”, *Sci. Rep.* **4** (2014) 7230.
 74. G. Fiumara, O. Pandaram, G. Pellicane, F. Saija, “*Theoretical and computer simulation*

- study of phase coexistence of nonadditive hard-disc mixtures*”, J. Chem. Phys. **141** (2014) 214508.
75. A. M. Saitta, F. SAIJA, F. Petrucci, F. Guyot, “Reply to Bada et al.: Ab-Initio free-energy landscape of Miller-like prebiotic reactions”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **112** (2015) E343.
 76. M. Lòpez de Haro, C. Tejero, A. Santos, S. B. Yuste, G. Fiumara, F. SAIJA, “Virial coefficients and demixing in the Asakura--Oosawa model”, J. Chem. Phys. **142** (2015) 014902; **143** (2015) 029902.
 77. G. Cassone, P. V. Giaquinta, F. SAIJA, A. M. Saitta, “Liquid methanol under a static electric field”, J. Chem. Phys. **142** (2015) 054502.
 78. A. Santos, M. Lòpez de Haro, G. Fiumara, F. SAIJA, “The effective colloid interaction in the Asakura-Oosawa model. Assessment of non-pairwise terms from the virial expansion”, J. Chem. Phys. **142** (2015) 224903.
 79. G. Munaò, F. SAIJA, “Density and structural anomalies in soft-repulsive dimeric fluids”, Phys. Chem. Chem. Phys., **18** (2016) 9484.
 80. J. E. Sponer, R. Szabla, R. W. Gora, A. M. Saitta, F. Pietrucci, F. SAIJA, E. Di Mauro, R. Saladino, M. Ferus, S. Civis, J. Sponer, “Prebiotic synthesis of nucleic acids and their building blocks at the atomic level – merging models and mechanisms from advanced computations and experiments”, Phys. Chem. Chem. Phys., **18** (2016) 20047.
 81. G. Cassone, F. Creazzo, P. V. Giaquinta, F. SAIJA, A. M. Saitta, “Ab initio Molecular Dynamics study of an aqueous NaCl solution under an electric field”, Phys. Chem. Chem. Phys., **18** (2016) 23164.
 82. G. Cassone, J. Sponer, F. SAIJA, E. Di Mauro, A. M. Saitta, J. E. Sponer, “Stability of 2',3' and 3',5' cyclic nucleotides in formamide and in water: a theoretical insight into the factors controlling accumulation of nucleic acid building blocks in the prebiotic pool”, Phys. Chem. Chem. Phys., **19** (2017) 1817.
 83. G. Munaò, F. SAIJA, “Integral equation study of soft-repulsive dimeric fluids”, J. Phys.: Condens. Matter **29** (2017) 115101.
 84. G. Cassone, F. Pietrucci, F. SAIJA, F. Guyot, A. M. Saitta, “One-step electric-field driven methane and formaldehyde synthesis from liquid methanol”, Chem. Sci., **8** (2017) 2329.
 85. V. Mollica-Nardo, F. Aliotta, M. A. Mastelloni, R. C. Ponterio, F. SAIJA, S. Trusso, C. S. Vasi, “A spectroscopic approach to the study of organic pigments in the field of cultural heritage”, Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche Matematiche e Naturali, ISSN 1825-1242, vol. LXXXXV (2017);
 86. G. Cassone, F. Pietrucci, F. SAIJA, F. Guyot, J. Sponer, J. Sponer, A. M. Saitta, “Novel electrochemical route to cleaner fuel dimethyl ether”, Sci. Rep., **7** (2017) 6901.
 87. G. Cassone, F. Creazzo, P. V. Giaquinta, J. Sponer, F. SAIJA, “Ionic diffusion and proton transfer in aqueous solutions of alkali metal salts”, Phys. Chem. Chem. Phys., **19** (2017) 20420; 2017 HOT Articles Collection.
 88. G. Fiumara, F. SAIJA, G. Pellicane, M. Lòpez de Haro, A. Santos, S. B. Yuste, “Virial coefficients, equation of state, and demixing of binary asymmetric nonadditive hard-disk mixtures”, J. Chem. Phys. **147** (2017) 164502.
 89. G. Cassone, J. Sponer, J. E. Sponer, F. Pietrucci, A. M. Saitta, F. SAIJA “Synthesis of (D)-erythrose from glycolaldehyde aqueous solutions under electric field”, Chem. Comm., **54** (2018) 3211.

90. G. Cassone, G. Calogero, J. Sponer, F. SAIJA, “Mobilities of iodide anions in aqueous solutions for applications in natural dye-sensitized solar cells”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20** (2018) 13038.
91. A. Santos, F. SAIJA, P. V. Giaquinta, “Residual Multiparticle entropy for a fractal fluid of hard spheres”, *Entropy* **20** (2018) 544.
92. G. Cassone, D. Chillé, C. Foti, O. Giuffré, R. C. Ponterio, J. Sponer, F. SAIJA, “Stability of hydrolytic arsenic species in aqueous solutions: As^{3+} vs. As^{5+} ”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** (2018) 23272; 2018 HOT Articles Collection.
93. V. Mollica-Nardo, A. Sinopoli, L. Kabalan, R. C. Ponterio, F. SAIJA, S. Trusso, “SERS and DFT study of indigo adsorbed on silver nanostructured surface”, *Spectrochim. Acta A*, **205** (2018) 465.
94. G. Cassone, F. SAIJA, J. Sponer, J. E. Sponer, M. Ferus, M. Krus, A. Ciaravella, A. Jimenez-Escobar, C. Cesare Cecchi-Pestellini, “Dust Motions in Magnetized Turbulence: Source of Chemical Complexity”, *The Astrophysical Journal Letters* **866** (2018) L23.
95. G. Cassone, F. Creazzo, F. SAIJA, “Ionic diffusion and proton transfer of MgCl_2 and CaCl_2 aqueous solutions: an ab initio study under electric field”, *Molec. Simul.* **45** (2019) 373.
96. G. Cassone, D. Chillé, F. Giacobello, O. Giuffré, V. Mollica-Nardo, R. C. Ponterio, F. SAIJA, J. Sponer, S. Trusso, C. Foti, “Interaction Between As(III) and Simple Thioacids in Water: An Experimental and Ab-initio Molecular Dynamics Investigation”, *J. Phys. Chem. B* **123** (2019) 6090.
97. G. Munaò, F. SAIJA, “Monte Carlo simulation and integral equation study of Hertzian spheres in the low-temperature regime”, *J. Chem. Phys.* **151** (2019) 134901.
98. G. Cassone, J. Sponer, S. Trusso, F. SAIJA, “Ab initio spectroscopy of water under electric field”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **21** (2019) 21169.
99. G. Munaò, F. SAIJA, “Evidence of structural inhomogeneities in hard-soft dimeric particles without attractive interactions”, *Materials* **13** (2020) 84.
100. F. Creazzo, S. Pezzotti, S. Bougueros, A. Serva, J. Sponer, F. SAIJA, G. Cassone, M. P. Gaigeot, “Enhanced conductivity of water at the electrified air-water interface: a DFT-MD characterization”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22** (2020) 10438.
101. D. Chillé, G. Cassone, F. Giacobello, O. Giuffré, V. Mollica-Nardo, R. C. Ponterio, F. SAIJA, J. Sponer, S. Trusso, C. Foti, “Removal of As(III) from biological fluids: mono-versus di-thiolic ligands”, *Chem. Res. Toxic.* **33** (2020) 967.
102. G. Cassone, D. Chillé, V. Mollica-Nardo, O. Giuffré, R. C. Ponterio, J. Sponer, S. Trusso, F. SAIJA, C. Foti, “Arsenic-nucleotides interactions: an experimental and computational investigation”, *Dalton Transactions* **49** (2020) 6302.
103. G. Cassone, A. Sofia, J. Sponer, A. M. Saitta, F. SAIJA, “Ab Initio Molecular Dynamics Study of Methanol-Water Mixtures under External Electric Fields”, *Molecules* **25** (2020) 3371.
104. V. Mollica-Nardo, G. Cassone, R. C. Ponterio, F. Saija, M. Tommasini, S. Trusso, “Electric-Field-Induced Effects on the Dipole Moment and Vibrational Modes of the Centrosymmetric Indigo Molecule” *J. Phys. Chem. A*, **124** (2020) 10856.
105. M. Ferus et al. “Ariel – a window to the origin of life on early earth?”, *Experimental Astronomy* **53** (2022) 679.
106. G. Cassone, J. Sponer, S. Trusso, F. SAIJA, “Electric Field and Temperature Effects on the Ab Initio Spectroscopy of Liquid Methanol”, *Applied Sciences* **11** (2021) 5457.

107. G. Cassone, F. SAIJA, J. Sponer, J. E. Sponer, A. Jimenez-Escobar, A. Ciaravella, C. Cesare Cecchi-Pestellini, “Atomistic simulations of the free-energy landscapes of interstellar chemical reactions: the case of methyl isocyanate”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **504** (2021) 1565.
108. G. Cassone, F. SAIJA, “Interstellar chemical reactions toward the synthesis of the life's building blocks Comment on "Insoluble organic matter in chondrites: Archetypal melanin-like PAH-based multifunctionality at the origin of life?", *Physics of Life Reviews* **38** (2021) 140;
109. E. Previti, C. Foti, O. Giuffr , F. SAIJA, J. Sponer, G. Cassone, “Ab initio molecular dynamics simulations and experimental speciation study of levofloxacin under different pH conditions”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** (2021) 24403;
110. C. Abate, G. Cassone, M. Cordaro, O. Giuffr , V. Mollica-Nardo, R. C. Ponterio, F. SAIJA, J. Sponer, S. Trusso, C. Foti, “Understanding the behavior of carnosine in aqueous solution: an experimental and quantum-based computational investigation on acid-base properties and complexation mechanisms with Ca^{2+} and Mg^{2+} ”, *New Journal of Chem.* **45** (2021) 20352;
111. G. Cassone, J. Sponer, F. SAIJA, “Molecular dissociation and proton transfer in aqueous methane solution under electric field”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** (2021) 25649;
112. G. Cassone, J. Sponer, F. SAIJA, “Ab initio Molecular Dynamics Studies of the Electric-Field-Induced Catalytic Effects on Liquids”, *Topics in Catalysis* **65** (2022) 40;
113. D. Chill , V. Mollica-Nardo, O. Giuffr , C. Foti, R. C. Ponterio, F. SAIJA, J. Sponer, S. Trusso, G. Cassone, “Binding of Arsenic by Common Functional Groups: An Experimental and Quantum-Mechanical Study”, *Applied Sciences* **12** (2022) 3210;
114. M. Ferus *et al.* “Formamide-Based Post-Impact Thermal Prebiotic Synthesis in Simulated Craters: Intermediates, Products and Mechanism”, *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* **9** (2022) 882145.
115. G. Pellicane, E. Lomba, F. SAIJA, “Theory and equation of state of two-component nonadditive hard-disk: an application in the colloidal regime”, *Physics and Chemistry of Liquids* **60** (2022) 463.
116. G. Amante, J. E. Sponer, J. Sponer, F. SAIJA, G. Cassone, “A Computational Quantum-Based Perspective on the Molecular Origins of Life's Building Blocks”, *Entropy*, **24** (2022) 1012.
117. G. Cassone, J. Sponer, J. E. Sponer, F. SAIJA, “Electrofreezing of Liquid Ammonia”, *Journal of Phys. Chem. Lett.* **13** (2022) 9889.
118. V. C. Nibali, S. Maiti, F. SAIJA, M. Heyden, G. Cassone, “Electric-field induced entropic effects in liquid water”, *J. Chem. Phys.* **158** (2023) 184501.
119. G. Cassone, F. SAIJA, J. Sponer, S. Shaik, “The Reactivity-Enhancing Role of Water Clusters in Ammonia Aqueous Solutions”, *Journal of Phys. Chem. Lett.* **14** (2022) 7808.
120. M. Ferus *et al.* “Simulating asteroid impacts and meteor events by high-power lasers: from the laboratory to space borne missions”, *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* **10** (2023) 1186172.
121. K. Mrazikova, A. Knizek, H. Saeidifirozeh, L. Petera, S. Civis, F. SAIJA, G. Cassone, P. B. Rimmer, M. Ferus, “A Novel Abiotic Pathway for Phosphine Synthesis over Acidic Dust in Venus' Atmosphere”, *Astrobiology* **24** (2024) 407.

122. C, Abate, O. Giuffrè, A. Amadeo, F. SAIJA, G. Cassone, C. Foti, “*Experimental and computational study on morin and its complexes with Mg 2+, Mn 2+, Zn 2+, and Al 3+: Coordination and antioxidant properties*”, J. Inorg. Biochem. **258** (2024) 112635.
123. M. F. Torre, A. Amadeo, G. Cassone, M. Tommasini, K. Mrazikova, F. SAIJA, “*Water Dimer under Electric Fields: An Ab Initio Investigation up to Quantum Accuracy*”, J. Phys. Chem. A, **128** (2024) 5490.
124. G. Munaò, F. SAIJA, G. Cassone, “*The structure of water-ammonia mixtures from classical and ab initio molecular dynamics*”, J. Chem. Phys. **161** (2024) 094503.
125. F. Carnamucio, C. Foti, M. Cordaro, F. SAIJA, G. Cassone, S. R. P. Da Rocha, O. Giuffrè, “*Metal Complexation for the Rational Design of Gemcitabine Formulations in Cancer Therapy*”, ACS Appl. Mater. Interfaces, XXX (2024) XXXXX.

***In blu e grassetto le pubblicazioni con più di 40 citazione (WoS source)**

ATTIVITÀ DI TERZA MISSIONE

Comunicati CNR

- <https://www.cnr.it/it/comunicato-stampa/8974/l-elettricitra-raffredda-l-acqua-lo-dimostra-il-calcolatore>
- <https://www.cnr.it/it/news/8357/all-origine-della-vita-meccanismi-chimico-fisici-alla-base-della-formazione-di-molecole-prebiotiche-nello-spazio>
- <https://www.cnr.it/it/comunicato-stampa/8026/una-simulazione-svela-l-origine-delle-prime-molecole-biologiche>
- <https://www.cnr.it/it/news/7615/verso-una-nuova-sintesi-elettrochimica-di-un-combustibile-green-l-etere-dimetilico>
- <https://www.cnr.it/it/comunicato-stampa/5872/riprodotti-al-computer-i-mattoni-della-vita>
- <https://www.cnr.it/it/comunicato-stampa/11483/a-new-solid-phase-of-ammonia>
- <https://www.cnr.it/it/comunicato-stampa/11992/l-elettricitra-riduce-l-entropia-nell-acqua>

Articoli usciti su quotidiani italiani ed internazionali e riviste specializzate

- <https://www.scientificamerican.com/article/new-steps-shown-toward-creation-of-life-by-electric-charge/>
- <http://www.techtimes.com/articles/16046/20140919/new-step-revealed-in-early-creation-of-life.htm>
- https://www.spacedaily.com/reports/New_Study_Revisits_Miller_Urey_Experiment_at_the_Quantum_Level_999.html
- <https://www.spiegel.de/wissenschaft/natur/bausteine-des-lebens-entstehung-von-aminosaeuren-im-computer-simuliert-a-990625.html>
- <https://phys.org/news/2014-09-revisits-miller-urey-quantum.html>
- <https://deepcarbon.net/feature/computational-study-reproduces-miller-urey-experiment>
- <https://www.chemistryworld.com/news/computer-simulations-point-to-formamide-as-prebiotic-intermediate-in-miller-mixtures/7752.article>

- <https://www.astrobio.net/origin-and-evolution-of-life/new-study-revisits-miller-urey-experiment-quantum-level/>
- <https://www.researchitaly.it/en/news/computer-based-origins-of-life/#null>
- <https://www.pourlascience.fr/sd/chimie/une-soupe-primordiale-numerique-11995.php>
- https://www.sciencesetavenir.fr/fondamental/l-origine-de-la-vie-reproduite-par-ordinateur_23163
- <https://www.lefigaro.fr/sciences/2014/09/09/01008-20140909ARTFIG00154-la-soupe-primordiale-de-la-vie-synthetisee-par-ordinateur.php>
- https://www.repubblica.it/scienze/2018/10/17/news/la_scintilla_della_vita_generata_dagli_urti_tra_polveri_interstellari-209230593/
- <https://www.lastampa.it/scienza/2014/09/09/news/cnr-ripodotti-al-computer-i-mattoni-della-vita-1.35611449>
- http://www.lescienze.it/news/2014/09/09/news/esperimenti_miller_origine_vita_campo_elettrico_guanina_rna-2277589/
- https://www.galileonet.it/blog_post/riprodotta-al-computer-lorigine-della-vita/
- <http://www.tvsvizzera.it/tvs/qui-mondo/la-vita-esiste-grazie-ad-una-scarica-elettrica/42661754>
- <http://www.saperescienza.it/news/terra-clima/la-vita-arrivo-da-una-scintilla-lo-conferma-uno-studio-italo-francese-26-09-2014/307-la-vita-arrivo-da-una-scintilla-lo-conferma-uno-studio-italo-francese-26-09-2014>
- http://www.treccani.it/magazine/atlanter/cultura/Una_scintilla_all_origine_della_vita.html
- https://www.repubblica.it/scienze/2018/10/17/news/la_scintilla_della_vita_generata_dagli_urti_tra_polveri_interstellari-209230593/
- <https://tg24.sky.it/scienze/2018/04/04/cnr-simulazione-prime-molecole-biologiche>
- <https://www.media.inaf.it/2018/10/16/urti-molecole-prebiotiche/>
- <https://www.gocciagoccia.it/lelettricità-raffredda-lacqua-il-responso-del-supercomputer/>
- <https://www.cnr.it/it/news/10379/ricercatori-cnr-ipcf-curano-un-volume-sulla-chimica-prebiotica>
- <https://rtp.gazzettadelsud.it/programmi/telegiornale/2022/11/12/ammoniaca-solida-una-scoperta-tutta-messinese-a9da7e79-e3d3-4ec0-8c82-babf31dd6051/>
- https://www.lescienze.it/news/2023/06/08/news/lelettricità_riduce_lentropia_nellacqua-12330331/
- Intervista su Focus n. 272, “All’origine della vita”, Giugno 2015. Articolo di Marco Ferrari, pag. 94-98: <https://www.focus.it/mondo-focus/focus-e-speciali/focus/272>
- Seminari per Alternanza Scuola/Lavoro sull’Origine della Vita