

**N R**

**Prof. Nadia Rega**

## CONTATTI



### INDIRIZZO

Dipartimento di Scienze Chimiche  
– Università di Napoli Federico II -  
Via Cintia I-80126 Napoli, Italia



### RECAPITI TELEFONICI

081-674207



### EMAIL

nadia.rega@unina.it



### WEBSITE

<http://www.scienzechimiche.unina.it/ricerca/thecraft>



### SKYPE

nadia.rega

**13 Marzo 2023**

---

**CV versione in breve**

## Formazione e carriera professionale

- 2018 ad oggi Professore Ordinario di Chimica Fisica presso il Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Napoli Federico II
- 2010-2018 Professore Associato di Chimica Fisica presso il Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Napoli Federico II
- 2012 Abilitazione al concorso di I Fascia, settore 03/A2, tornata 2012 ASN (Id. 33658)
- 2002-2010 Ricercatore (CHIM/02) presso il Dipartimento di Chimica, Università di Napoli Federico II
- 2001-2002 Postdoc presso il Department of Chemistry, University of Utah, UT, USA
- 1998-2001 Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche

## Affiliazione a società scientifiche e centri di ricerca

- 2022 ad oggi Membro dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN)
- 2019 ad oggi Membro dell'American Physical Society (APS)
- 2014 ad oggi Membro dell'American Chemical Society (ACS).
- 2010 ad oggi Membro del Centro Interdipartimentale di Ricerca sui Biomateriali (CRIB) dell'Ateneo Federico II di Napoli
- 2000 ad oggi Membro del Consorzio Interuniversitario Nazionale di Scienza e Tecnologia dei Materiali (INSTM).
- 2000 ad oggi Membro della Società Chimica Italiana (SCI), affiliata alla Divisione di Chimica Teorica e Computazionale e alla Divisione di Chimica Fisica
- 2005, 2006, 2008-2013  
Responsabile della Sezione di Calcolo del Centro Interdipartimentale di Metodologie Chimico Fisiche (CIMCF) dell'Ateneo Federico II di Napoli

## Parole chiave degli interessi scientifici

Simulazioni di spettroscopia dello stato stazionario e risolta nel tempo (IR, Raman, UV, XAS) e di proprietà magnetiche (NMR, EPR) di sistemi molecolari in fase condensata e di interesse astrochimico e dell'ambiente; simulazione della foto-reattività di sistemi biologici e di interesse ambientale; dinamica molecolare ab-initio; modelli del continuo polarizzabile e condizioni non periodiche al contorno in dinamica molecolare; metodi ibridi quanto meccanici e meccanica molecolare; teoria del funzionale della densità.

## Attività gestionale e istituzionale per il dottorato, la didattica e la ricerca

- 2020 ad oggi Membro del Collegio Docenti Dottorato in *Molecular Science for Earth and Space* (MOSES) della Scuola Superiore Meridionale (cicli XXXVII e XXXVIII)
- 2019 Membro del Collegio Docenti Dottorato in Astrochimica della Scuola Normale Superiore (ciclo XXXVI)
- 2010-2018 Membro del Collegio Docenti Dottorato in Scienze Chimiche per i cicli dal XXVI al XXXV
- 2014-2020 Membro della Jury in quattro sedute di Esame finale di Dottorato alla École nationale supérieure de chimie de Paris, ParisTech, Parigi.
- 2017 Presidente commissione esame finale di Dottorato in Scienze Chimiche, Università di Parma

|              |   |
|--------------|---|
| 2021-2023    | Componente della Commissione Abitazione Scientifica Nazionale (ASN) per il Settore Concorsuale 03/A2        |
| 2022 ad oggi | Presidente della Commissione Ricerca del Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Napoli Federico II |
| 2016-2022    | Componente della Commissione Ricerca del Dipartimento di Scienze Chimiche della Federico II                 |
| 2018-2022    | Membro del Gruppo del Riesame (GRIE) per la Laurea Magistrale in Scienze Chimiche della Federico II         |
| 2003-2008    | Membro della Giunta Didattica del CCL in Chimica e Scienze Chimiche della Federico II                       |

## Attività didattica

### *Corso di dottorato MOSES Scuola Superiore Meridionale*

|                            |   |
|----------------------------|---|
| a.a. 2021/22; a.a. 2022/23 | Experimental and theoretical chemistry for sustainability, corso 'pillar' per dottorandi MOSES del XXXVII e XXXVIII ciclo |
|----------------------------|---|

### *Corsi di laurea Università di Napoli Federico II*

|                                  |   |
|----------------------------------|---|
| Da a.a. 2008/09 ad a.a. 2022/23  | Complementi di Chimica Fisica Mod. A, Laurea Magistrale in Scienze Chimiche                   |
| da a.a. 2010/11 ad a.a. 2022/23  | Chimica Computazionale, Laurea Magistrale in Scienze Chimiche                                 |
| a.a. 2021/22; a.a. 2022/23       | Chimica fisica dei materiali e delle superfici, Laurea in Scienza ed Ingegneria dei Materiali |
| a.a. 2016/17-2018/19; 2020/21    | Chimica Fisica, Laurea in Tecnologie alimentari   |
| Da a.a. 2008/09 ad a.a. 2009/10: | Chimica Fisica III, Laurea in Chimica   |
| a.a. 2007/08 e a.a. 2010/11      | Chimica Fisica, Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie per la natura e l'ambiente          |
| Da a.a. 2003/04 a a.a. 2006/2007 | Modelli ed algoritmi per la Chimica Molecolare, Laurea in Chimica                             |
| a.a. 2004/05 e a.a. 2006/07      | Termodinamica statistica, Laurea Specialistica in Scienze Chimiche                            |
| a.a. 2003/04                     | Bioinformatica, Laurea in Chimica (Laurea triennale)  |
| a.a. 2004/05                     | Esercitazioni di Chimica Fisica III Laurea in Chimica (Laurea quinquennale)                   |
| Da a.a. 2003/04 a a.a. 2006/2007 | assistenza a Chimica Fisica III, Laurea in Chimica (Laurea triennale)                         |
| a.a. 2005/2006                   | assisteza a Chimica Generale, Laurea in Scienze Biologiche                                    |
| a.a. 2002/2003 e a.a. 2003/2004  | assistenza a Laboratorio di Chimica Fisica II, Laurea in Chimica                              |

### *Scuole nazionali e internazionali*

|                  |   |
|------------------|---|
| 07-08 2014       | Gaussian G09 Workshop in University of Ulm, Germany   |
| 12/2004- 04/2005 | Corso di alta formazione in 'Bioinformatica ', centro regionale di Competenza in Biotecnologie Industriali BioTekNet (regione Campania) |

|         |  |
|---------|--|
| 02/2005 | Terza Scuola di Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia. |
| 02/2003 | Scuola di Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali, Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia.       |

## **Attività di supervisione di ricerca**

Relatore di più di 25 tesi di laurea in Chimica e Magistrale in Scienze Chimiche; supervione di piu'di 10 progetti di Dottorato.

## **Parametri bibliometrici riferiti alle pubblicazioni 1996-2023**

*(Database Scopus e WOS, Marzo 2023):*

Numero lavori: 101 (94 articoli e reviews, 2 capitoli libro, 1 editoriale, 4 abstracts indicizzati)

H index riferito alla carriera: 32

IF medio su lavori: 6.0

Numero di citazioni totali 11706

Percentuale di pubblicazioni come corresponding author: 70%

## **Lectures e contributi orali a congressi nazionali e internazionali**

Partecipazione a numerose conferenze nazionali e internazionali, delle quali piu'di 25 **su invito**