



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

DIPARTIMENTO DI CHIMICA

Prof. Davide M. Proserpio



CURRICULUM VITAE

COGNOME	PROSERPIO
NOME	DAVIDE MARIA
DATA DI NASCITA	17 LUGLIO 1962

- Professore II fascia** **12/2003 – oggi**
Università degli studi di Milano
- Ricercatore** **4/1992 – 12/2003**
Università degli studi di Milano
- Visiting Scientist** **11/1989 - 9/1991**
Prof. Roald Hoffmann, Dept. of Chemistry, Cornell University, Ithaca, NY (USA)
- Borsista CNR** **12/1987 - 10/1989**
Dott. Carlo Mealli, I.S.S.E.C.C. - CNR, Firenze
- Università di Pavia** **7/1986**
Laurea in Chimica con lode, Relatore: Professor Luigi Fabbrizzi con la tesi: "Sintesi e coordinazione di macrocicli poliazotati contenenti eteroatomi del gruppo 16."

Davide M. Proserpio incomincia ad interessarsi alla chimica dagli anni della scuola superiore, dove si diploma con 60/60 nel luglio del 1981 come perito chimico presso l'Istituto Tecnico Industriale di Setificio 'Paolo Carcano' di Como. Prosegue gli studi vincendo un posto presso l'Almo Collegio Borromeo di Pavia (il mantenimento del posto presso il Collegio è vincolato ad essere in corso con gli esami e con una media minima di 27/30), dove frequenta il corso di Laurea in Chimica all'Università di Pavia. Nei mesi di settembre ed ottobre del 1985 visita il Polytechnic of North London nell'ambito di una collaborazione tra il Prof. Luigi Fabbrizzi ed il Prof. Peter A. Tasker. Dopo aver conseguito la laurea con lode in chimica nel luglio del 1986 ed aver superato nel novembre 1986 l'esame di stato per l'abilitazione all'esercizio della professione di chimico, parte per il servizio militare svolto dal 12/1986 al 11/1987.

Nella primavera del 1987 partecipa al concorso per una borsa di Dottorato di Ricerca da svolgersi presso l'Università di Pavia, e vince un posto, ma vi rinuncia per accettare una borsa CNR da utilizzarsi presso l'Istituto per lo Studio della Stereochimica ed Energetica dei Composti di Coordinazione (ISSECC) di Firenze sotto l'attenta guida del Dott. Carlo Mealli (Dirigente di Ricerca CNR). Questa scelta segna una svolta nella preparazione scientifica del Dott. Proserpio: nei due anni trascorsi a Firenze matura una conoscenza approfondita del legame chimico e delle relazioni struttura/proprietà dei sistemi inorganici. Nell'affrontare lo studio degli aspetti stereochimici di sistemi mono e polimetallici, s'impadronisce dei metodi di calcolo di Orbitale Molecolare (semiempirici di tipo Extended Hückel, EH) e dà un sostanzioso contributo allo sviluppo di un pacchetto di calcolo per PC (CACAO) che per la sua utilità viene ancora oggi utilizzato in molti laboratori di tutto il mondo.



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

DIPARTIMENTO DI CHIMICA

L'articolo pubblicato sul J. Chem. Education nel 1990 [n° 10 nell'elenco alla fine] è il sesto più citato della rivista con circa 837 citazioni. Il programma viene ancora usato per la didattica in alcuni gruppi di ricerca. All'ISSECC CNR di Firenze approfondisce inoltre gli studi della cristallografia e dei metodi di determinazione strutturale con i raggi-X da cristallo singolo (iniziati nella collaborazione londinese).

Il bagaglio di conoscenze costruito a Firenze gli permette successivamente di entrare con un'ottima preparazione di base nella scuola del Professor Hoffmann (Nobel in chimica nel 1981 per la teoria degli Orbitali di Frontiera, sviluppata in parte con il calcolo EH) e di risultare da subito uno dei membri più competenti e consultati. Tale esperienza inizia già nell'estate 1988 quando, grazie ad una borsa CNR ed al Dott. Mealli, fa una prima visita breve alla Cornell University. Nel settembre 1989 inizia un soggiorno di due anni ad Ithaca (NY) - USA in qualità di Visiting Scientist. In questo periodo approfondisce le potenzialità del calcolo EH e nascono i primi interessi per la chimica dello stato solido.

Nel settembre 1991 rientra dagli USA per concorrere ad un posto di Ricercatore presso l'allora Istituto di Chimica Strutturistica e Stereochimica Inorganica dell'Università di Milano, dove prende servizio nell'aprile 1992 e si affiancherà al Prof. Gianfranco Ciani che con la dott.ssa Lucia Carlucci creeranno un gruppo molto affiatato. Nel 1993 si viveva una entusiasmante stagione di rinnovamento in seguito alle idee circolanti nella comunità scientifica sull'emergente area della crystal engineering. I lavori di Robson sulla costruzione di networks di coordinazione e di Desiraju sulle interazioni supramolecolari stimolarono il gruppo ad orientarsi in quella direzione. Si decise di dar vita nel Dipartimento ad un Laboratorio di sintesi (grazie alla esperienza della dott.ssa Carlucci), caratterizzazione strutturale e studio delle proprietà di materiali polimerici di coordinazione. I contributi del dott. Proserpio a tale iniziativa, ricca di utili risultati, sono stati essenziali, sia nelle innumerevoli investigazioni cristallografiche (circa 1000 specie cristalline analizzate), che nello studio delle topologie dei nuovi networks e dei fenomeni di interpenetrazione e di interdigitazione, che nell'analisi delle proprietà di nanoporosità. Le ricerche hanno condotto alla caratterizzazione di numerosi networks, affascinanti sia dal punto di vista topologico, che per le loro potenziali proprietà di materiali zeolitici. Il Dott. Proserpio ha saputo brillantemente trarre dalle classiche analisi di Crystal Chemistry (Wells, O'Keeffe, etc.) interessanti spunti per lo studio dei nuovi prodotti polimerici che riuscivamo man mano a preparare. La maggior originalità dei suoi contributi consiste proprio nell'attenzione meticolosa rivolta agli aspetti topologici di tali sistemi, sia come networks singoli che come architetture interpenetrate, non in modo astratto, bensì per poter ricollegare la struttura alle proprietà chimico-fisiche del materiale e per poter acquisire fondamenti più certi della crystal engineering. Tale approccio, messo bene in luce sia nelle pubblicazioni che nei numerosi seminari su invito, ha sicuramente avuto un impatto positivo sui diversi gruppi di ricerca nell'area. Il suo contributo viene riconosciuto dalla Società Chimica Italiana che nel 2002 gli conferisce la Medaglia Nasini per i significativi risultati raggiunti nel campo della Chimica Inorganica. Questo periodo molto fruttuoso è testimoniato da undici



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

DIPARTIMENTO DI CHIMICA

pubblicazioni tra il 1994 e il 2004 che hanno ricevuto almeno 200 citazioni [si veda l'elenco alla fine ai numeri 22(1994); 28(1995); 35(1995); 43(1997); 48(1997); 54(1998); 65(1999); 75(2000); 88(2003); 92(2003); 94(2004)]. In particolare la (Coord. Chem. Rev. 2003, #92) è il sesto lavoro più citato della rivista, infatti non è una semplice rassegna di altre pubblicazioni ma una rielaborazione ed analisi di centinaia di strutture intrecciate che apre la strada alla "topological crystal chemistry".

Nel 2003 legge una pubblicazione intitolata "Search for isotypism in crystal structures by means of the graph theory" scritto dal Prof. Vladislav Blatov (della Samara State University, Samara - Russia) dove si descrive un programma di analisi topologica delle strutture cristalline (Topos), e decide di contattarlo, avendo riconosciuto le grandi potenzialità di questo approccio computazionale. Da allora incomincia una intensa collaborazione che culminerà nel 2013 con l'assegnazione da parte del governo russo di una Megagrant triennale (poi rinnovata per altri due fino a tutto il 2017) nell'ambito del piano di investimento scientifico "Attracting Leading Scientists to Russian Educational Institutions" <http://www.p220.ru/en/>. Il suo compito nell'ambito del progetto è creare e dirigere un centro di calcolo per la progettazione e studio di nuovi materiali presso l'Università di Samara (nel distretto federale del Volga) con il Prof. Blatov. I vincitori sono stati 42 su 720 domande con partecipanti da 40 nazioni. Il progetto dal titolo "Methods for theoretical prediction of materials with specified physical properties" è stato finanziato con circa 2.1 milioni di euro ed ha creato il "Samara Center for Theoretical Material Science"- SCTMS di cui Davide M. Proserpio è il direttore scientifico dal giugno 2013.

Si veda il sito <http://english.sctms.ru/about/> per ulteriori informazioni.

Si veda anche <http://www.chimica.unimi.it/ecm/home/aggiornamenti-e-archivi/tutte-le-notizie/content/assegnato-al-prof-davide-maria-proserpio-dal-governo-russo-un-grant-attracting-leading-scientists-to-russian-educational-institutions.0000.UNIMIDIRE-9212>

D. M. Proserpio è coautore di 202 pubblicazioni su riviste internazionali con referee e 2 capitoli di libri,

H-index = 67 (WebOfScience 17406 citazioni, 16765 senza self-citazioni)

H-index = 67 (Google Scholar 18572 citazioni)

H-index = 67 (Scopus 17582 citazioni)

La lista completa delle pubblicazioni con il numero di citazioni è consultabile agli indirizzi: <http://www.researcherid.com/rid/C-6391-2009>

(indicizzata da Web of Science)

<http://scholar.google.com/citations?user=7jye64cAAAAJ>

(indicizzata da Google Scholar)

<http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004480576>

(indicizzata da Scopus)



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

DIPARTIMENTO DI CHIMICA

D. M. Proserpio ha sviluppato un particolare interesse per lo studio della topologia delle strutture cristalline applicato al campo delle architetture metallo-organiche, MOF e Coordination Polymers (basati su interazioni covalenti e/o coordinative #88, 92, 96, 102) e dei networks supramolecolari (basati su interazioni deboli/secondarie e legami ad idrogeno (#118, 119). La completa definizione (#104, 109, 111, 134, 137) e classificazione delle strutture periodiche (#141), dei reticoli (nets #104) che le costruiscono e delle loro interrelazioni topologiche (intreccio, nodi, interpenetrazione, catenazione, cavità 88, 92, 96, 102, 111, 130, 133, 170) è un campo che, grazie agli studi suoi e del suo gruppo, è tornato di grande importanza, poichè è solo se conosciamo esattamente tutte le possibilità che possiamo progettare nuovi impaccamenti cristallini e quindi nuovi materiali.

I lavori #88, 92, 96 sono stati ampiamente citati quale articoli di riferimento per lo studio dell'intreccio topologico osservato nelle strutture cristalline dei nuovi materiali metallo-organici (MOF). In particolare il #96 sulla topologia dell' interpenetrazione è stato segnalato per il febbraio 2006 come "Fast Breaking Paper" dall' ISI Essential Science Indicators Web Product - ESI (vedi http://www.esi-topics.com/fbp/2006/february06-Blatov_Proserpio.html). Questo stesso lavoro assieme ad altri tre (#96, 141, 134, 88) si collocano tra i primi 15 lavori più citati su CrystEngComm ai posti 4°,8°,9° e 15° rispettivamente.

L'analisi topologica delle strutture cristalline viene condotta con il programma ToposPro sviluppato in collaborazione con il Prof. V.A. Blatov (Samara University, Russia). Il programma recentemente rinnovato e descritto in #159 è molto utilizzato dai ricercatori nel campo delle architetture metallo-organiche (Metal Organic Frameworks MOF e Coordination Polymers CP). La sua popolarità si evince anche dall'elevato numero di citazioni (904) che ha ottenuto dal giugno 2014, arrivando ad essere il lavoro più citato in assoluto di Crystal Growth & Design. L'insegnamento della "topological crystal chemistry" ha prodotto 15 scuole internazionali che hanno coinvolto più di 350 studenti da tutto il mondo e decine di seminari (si veda l'elenco più sotto)

Recentemente sono state sviluppate nuove applicazioni dell'analisi topologica delle strutture per composti a cluster (#142, 144, 157) e per composti intermetallici (#129, 136, 155, 167) consentendo di organizzare una mole di dati e modelli altrimenti di difficile accesso e di ambigua interpretazione. In particolare il nuovo approccio sui composti intermetallici è stato apprezzato dalla comunità dei ricercatori del settore che ha invitato il prof. Proserpio a tenere una Keynote Lecture al congresso di Genova del 2015 (si veda {52}. Il lavoro #129 ha ottenuto la copertina di Inorganic Chemistry.

L'applicazione dell'approccio topologico alle zeoliti ha portato alla ridefinizione rigorosa e computazionale delle SBU (Structural Building Units) basato sulle "natural tiles" (#111, 130), un metodo di partizioni che ora è stato adottato ufficialmente dalla International Zeolite Association e implementato on-line nel Database of Zeolite Structures <http://www.iza-structure.org/databases/> e http://europe.iza-structure.org/IZA-SC/Help_Str.htm#Tilings Lo stesso metodo è ora utilizzato per



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

DIPARTIMENTO DI CHIMICA

cercare di selezionare possibili zeoliti tra le innumerevoli calcolate (#150) e nuovi MOF (#164).

L'analisi topologica delle interazioni in cristalli molecolari si è rivelata utile per selezionare materiali sfaldabili (cleavable organic crystals) (#171).

L'interesse alle zeoliti si è trasferito nella ricerca di strutture ipotetiche del carbonio come descritto in #165 (per altre applicazioni vedi #170), un settore in così rapida espansione dopo la scoperta del grafene che ha portato Proserpio con i suoi collaboratori russi a creare un database di tutte gli allotropi di carbonio (SACADA <http://sacada.sctms.ru/>) descritto in collaborazione con Roald Hoffmann in #175.

La "topological crystal chemistry" ha portato a numerose collaborazioni con gruppi stranieri di quattro continenti (Italia, Germania, UK, Spagna, Russia, USA, Cina, Australia, Taiwan), come evidenziato dall'elenco di tutte le pubblicazioni.

D.M. Proserpio svolge attività di referee per le più importanti riviste internazionali: Nature, Science, Nature Chemistry, Nature Communication, Scientific Reports, J. Am. Chem. Soc., Inorg. Chem., Cryst. Growth & Des., Chem. Mater., Chem. Rev., Angew. Chem., Chem. Eur. J., Eur. J. Inorg. Chem., Chem. Commun., Dalton, New J. Chem., Coord. Chem. Rev., Inorg. Chim. Acta, Acta Cryst. A, ed altre riviste minori.

ATTIVITÀ DIDATTICA

Dall' AA 2003/2004 fino al 2015/2016 ha tenuto il corso di: "Chimica Generale con elementi di Chimica Fisica ed Esercitazioni" per la Laurea triennale in Scienze Biologiche con circa 150 studenti/anno e circa 200 esami/anno registrati.

Dall'AA 2011/2012 all'AA 2013/2014 ha tenuto le esercitazioni del Laboratorio di Chimica " per la Laurea triennale in Scienze Biologiche

Dall' AA 2005/2006 all' AA 2007/2008 ha tenuto un modulo del corso della Laurea triennale in Scienze Chimiche : "Chimica Inorganica (Cristallochimica)"

Negli AA 2007/2008 e 2008/2009 ha tenuto un modulo della Laurea triennale in Scienze Chimiche "Chimica dello Stato Solido"

Dall' AA 2008/2009 all' AA 2015/2016 ha tenuto il corso della Laurea triennale in Scienze Chimiche : "Metodi di Indagine Strutturale per materiali Inorganici"

Dall'AA 2016/2017 è titolare del corso annuale di "Chimica Inorganica" per circa 100 studenti del secondo anno della laurea triennale in Chimica e delle esercitazioni per il corso di laboratorio "Chimica Inorganica B" della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche

Relatore di due tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche e correlatore di numerosi tesi di laurea magistrale e di tre tesi di dottorato.

Ottiene un anno sabbatico per AA 2014/2015 per poter svolgere attività di ricerca presso il centro SCTMS da lui fondato a Samara (Russia) grazie alla Megagrant del governo russo.



ATTIVITÀ ORGANIZZATIVE

- Membro della Commissione Biblioteca d'Area di Chimica (dal nov. 2006 al 2016 anche Direttore Scientifico)
- Membro della Commissione d'Ateneo delle Biblioteche dal 2006 al 2016
- Membro della Commissione d'Ateneo per la Ricerca Scientifica - Comitato d'Area Chimica (dal 2006 al 2012)
- Responsabile AQ del Dipartimento di Chimica per la ricerca dal 2017.

CONSEGUIMENTO DI PREMI E RICONOSCIMENTI PER L'ATTIVITÀ SCIENTIFICA

Premio Raffaello Nasini 2002 della divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana.

E' conferito al più meritevole giovane scienziato italiano che ha dimostrato particolare abilità in tutti i campi della Chimica Inorganica. La restrizione di età è fissata in 40 anni o meno al 31 dicembre dell'anno in cui il premio è assegnato. Il premio consiste in una pergamena ed una medaglia consegnati successivamente ad una conferenza che il vincitore terrà durante l'annuale Congresso della Divisione. Motivazione : "Per i notevoli risultati conseguiti nell'ambito della chimica inorganica usando una varietà di approcci sperimentali e teorici che negli ultimi anni lo hanno portato a sviluppare importanti studi innovativi sulla chimica dei composti di coordinazione interpenetrati" Si veda l'elenco dei vincitori al sito http://dci.mfn.unipmn.it/premi_it.html

Keynote Lecture al XXII Congress of the International Union of Crystallography (IUCr) Madrid (Spagna) 22-30 agosto 2011, "Topological Characterization of Coordination Networks & Metal Metal-Organic Frameworks" introdotto da Omar Yaghi (Berkeley USA).

Le Keynote lectures sono tenute da ricercatori di prestigio scelti dalle commissioni della IUCr. Nel XXII congresso (triennale) ci sono stati 490 interventi e 36 Keynote Lectures con un totale di 2800 partecipanti

<http://www.iucr2011madrid.es/index.php/congress-report>



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

DIPARTIMENTO DI CHIMICA

SCUOLE, WORKSHOP e SEMINARI

D. M. Proserpio ha organizzato e tenuto lezioni dal 2005 quindici eventi internazionali per introdurre giovani ricercatori allo studio della topologia delle strutture cristalline

1. "Topology of crystal structures: nets, knots and surfaces" IUCr-XX congress, Microsymposium 66 - Firenze, agosto 2005. <http://xxiucr.iccom.cnr.it/ms66.htm>
<http://www.crystallography.fr/mathcryst/iucrXX-ms66.php>
2. "Theoretical Aspects of Design of Periodic Materials" CECAM workshop, Lione (Francia), luglio 2007 (con M. O'Keeffe) con 47 partecipanti da 15 nazioni. <http://www.cecama.org/workshop-155.html>
3. "ICMR Summer School on Periodic Structures and Crystal Chemistry", University of California, Santa Barbara USA, luglio 2008, (con M. O'Keeffe) con 36 studenti da 12 nazioni
<http://www.icmr.ucsb.edu/programs/archive/crystalchemistry.html>
4. "Summer Schools on Mathematical Crystallography" Nancy, France, 21 giugno - 2 luglio 2010 (con V.A. Blatov) con 47 studenti da 17 nazioni. <http://www.crystallography.fr/mathcryst/nancy2010.php>
5. "Computer methods in crystal structure systematics" Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany (con V.A. Blatov) 19-22 settembre 2011 con 36 studenti da 7 nazioni.
6. One day course introduction to TOPOS, su invito del Prof. M. Zaworotko, Department of Chemistry, University of South Florida (USF), Tampa, FL, USA, 9 marzo 2012. 12 studenti.
7. Summer School "Computer Topological Analysis of Molecular Crystals and Coordination Networks" organizzata dalla Universidad Internacional Menéndez Pelayo (Santander, Spain) 16-18 luglio 2012, alla quale hanno partecipato 23 studenti di dottorato e 4 professori provenienti da 4 nazioni.
<https://www.yumpu.com/en/document/view/27099757/computer-topological-analysis-of-molecular-crystals-and-topos>
8. School on "Computer topological analysis of MOFs and coordination networks" (con M. O'Keeffe). Lawrence Berkeley National Lab (California, USA), 4-7 Febbraio 2013. 25 studenti dai gruppi della Berkeley University (Omar Yaghi, Jeffrey Long) e Texas A&M (Zhou).
9. School on "Topological methods in crystal chemistry and materials science" (with V.A. Blatov). CECAM HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland. September 9-13, 2013. 35 studenti di dottorato e 4 professori provenienti da 16 nazioni. <http://www.cecama.org/workshop-869.html>
10. Organizzazione e Lezioni presso il centro SCTMS di Samara, Russia per due Scuole Internazionali "Topological methods for expert systems in Materials Science",
11. 3-7 febbraio 2014 e 12-16 Agosto 2014 alla quale hanno partecipato 50 studenti da 5 nazioni. Vedi: http://english.sctms.ru/novosti_centra/20160330-01/ e http://english.sctms.ru/novosti_centra/20160329-02/
12. Organizzazione dello IUPAC project meeting "Topology representations in coordination networks, metal-organic frame works and other crystalline materials" http://english.sctms.ru/novosti_centra/20150619_01/ parte del progetto "Terminology guidelines and database issues for topology representations in coordination networks, metal-organic frameworks and other crystalline materials" https://iupac.org/projects/project-details/?project_nr=2014-001-2-200. 21-23 maggio 2015 presso il centro SCTMS di Samara, Russia
13. Organizzazione e Lezioni presso il centro SCTMS di Samara Russia per una Scuola Internazionale "Combined Topological and DFT Methods for Prediction of New Materials" 15-20 settembre 2015 alla quale hanno partecipato 20 studenti da 7 nazioni. Vedi: http://english.sctms.ru/novosti_centra/nc_20151005_01/
14. One day course introduction to ToposPro, su invito del Prof. Jing Li, Rutgers University, Piscataway, NJ, USA, 11 maggio 2016. 15 studenti.
15. Organizzazione di un Workshop e di una scuola internazionale presso il centro SCTMS di Samara Russia: Workshop "Applications of topological methods in materials science". <http://english.sctms.ru/training/school/20160704-10/20160321-03/>. 1-2 luglio 2016. Scuola "Combined Topological and DFT Methods for Prediction of New Materials II". <http://english.sctms.ru/training/school/20160704-10/> 4-10 luglio 2016 alla quale hanno partecipato 20 studenti da 11 nazioni.



Comunicazioni orali a congressi e Seminari su invito dal 2005

- {34}- "Topological Analysis of Interpenetrated and Polycatenated Nanoporous Materials" Arizona State University ASU, Phoenix, Arizona USA, 28 novembre 2005 su invito di M. O'Keeffe
- {35}- "Topological Analysis of Interpenetrated and Polycatenated Nanoporous Materials" Università Basel, Basel, Svizzera, 15 maggio 2006 su invito di K. Fromm
- {36}- "Topological analysis of interpenetrated and polycatenated nanoporous materials" XVII Symposium of the Spanish Group of Crystallography, Sigüenza, Spagna, 13-16 giugno 2006.
- {37}-"Porphyrins as building blocks for the creation of functional coordination networks" International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines ICPP-4, Roma, 2-7 luglio 2006
- {38}-"Topological analysis of interpenetrated and polycatenated nanoporous materials" Workshop on Simulation, design and crystal engineering of metal-organic frameworks presso il CECAM di Lione , Francia luglio 2007
- {39}-"Graphs, nets and Tilings" meeting CHEM-MOD 2007 Chemical Graph Theory and Molecular Modeling Workshop, Università Babeş-Bolyai in Cluj – Romania: ottobre 2007
- {40} – Diverse lezioni per la ICMR Summer School on Periodic Structures and Crystal Chemistry, University of California, Santa Barbara USA, luglio 2008
- {41} - "Topological analysis of Interpenetrated and polycatenated nanoporous materials" Nanotechnology International Forum, Rusnanoforum, Mosca (Russia), dicembre 2008.
- {42} – Diverse lezioni per la "Summer Schools on Mathematical Crystallography" Nancy, France, 21 June - 2 July 2010 (con V.A. Blatov)
- {43} – Diverse lezioni per la scuola "Computer methods in crystal structure systematics" Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany , settembre 2011
- {44} - "Topological crystal chemistry: nets and entanglements in periodic structures" Topological Dynamics in Physics and Biology, July 12 - 13, 2011, Centro di Ricerca Matematica Ennio de Giorgi, Pisa, luglio 2011
- {45}- "Topological Characterization of Coordination Networks & Metal Metal-Organic Frameworks" Keynote Lecture, XXII Congress of the Int. Union of Crystallography (IUCr) Madrid (Spagna) 22-30 agosto 2011
- {46} - "Topological crystal chemistry: nets and entanglements in periodic structures" Special Session on Modeling Crystalline and Quasi-Crystalline Materials all' AMS (America Mathematical Society) Section Meeting in Tampa (Florida - USA), 10-11 Marzo 2012
- {47} - "From Eutax to Topos following Mike's path." Meeting: "Beautiful crystals for the world - A celebration of Michael O'Keeffe's half a century of contributions to symmetry and patterns in chemistry". Purbeck House Hotel, 91 High Street, Swanage, Dorset, UK, 3-4 maggio 2012.
- {48} - Lezioni per la Summer School "Computer Topological Analysis of Molecular Crystals and Coordination Networks" organizzata dalla Universidad Internacional Menéndez Pelayo (Santander, Spagna), luglio 2012.
- {49} - "Topological crystal chemistry: nets and entanglements in periodic structures" meeting: SMARTER 3 (Structure elucidation by coMbinIng mAgnetic Resonance, compuTation modElIng and diffRactions.) University of Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines (France), 10-13 settembre 2012.
- {50} - "Periodic Structures and Crystal Chemistry: A history of the topological approach to crystal chemistry by means of the cds net." Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil. 7 novembre 2013, su invito di J.-G. Eon
- {51} - Gordon Research Conference: Crystal Engineering: "Topological Characterization of Coordination Networks & Metal-Organic Frameworks : nets and entanglements in periodic structures" Waterville Valley Resort – USA. 2 giugno 2014. Lezione su invito di C. Aakeroy.
- {52} - SCTE 2014, 19th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements "The nanocluster approach to elucidate complex intermetallics" Genova, Italia. 26 giugno 2014 Comunicazione Orale su invito (Keynote Lecture)
- {53} - 1st European Crystallographic School "ToposPros: an introduction with practical examples" Pavia, Italia, 5 settembre 2014. Lezione su invito
- {54} - Associazione Italiana di Cristallografia: 2nd Joint AIC-SILS conference "Periodic Structures and Crystal Chemistry: A history of the topological approach to crystal chemistry by means of the cds net." 18 settembre 2014. Comunicazione Orale su invito (keynote lecture)
- {55} - International Scientific Conference: Science of the future "Topological methods in crystal chemistry and materials science" San Pietroburgo, Russia. 19 settembre 2014. Comunicazione Orale su invito



- {56} - "150 Years of Beautiful Structures and Defects" a symposium to honor Prof. Mike O'Keeffe and Prof. Osamu Terasaki "Entanglement in 2-periodic coordination networks" Ho-Chi Min City, Vietnam 15 novembre 2014. Comunicazione Orale su invito di Omar Yaghi
- {57} - Conference: "New Approaches in Materials Design" "Crystal structure topology as a key for materials design" Mosca, Russia. 11 dicembre 2014. Comunicazione Orale su invito del prof. Artem R. Oganov
- {58} - "Periodic Structures and Crystal Chemistry. A history of the topological approach to crystal chemistry by means of the cds net." Technische Universitaet Dresden, Institut fuer Physikalische Chemie, Dresden, Germania. 13 aprile 2015. Su invito di Igor Baburin.
- {59} - IUPAC project meeting and workshop: "Topology representations in coordination networks, metal-organic frameworks and other crystalline materials" Entanglements: old and new views. Samara Center for Theoretical Materials Science, Samara, Russia. 21 maggio 2015. Organizzazione e intervento.
- {60} - European Crystallographic Meeting "The nanocluster approach to elucidate complex intermetallics" Rovinj, Croatia. 24 agosto 2015. Comunicazione orale su invito.
- {60} - Conference of the Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) Mathematical Aspects of Materials Science. Lecture at the minisymposium on Mathematical Crystallography: "Entanglement in 2-Periodic Coordination Networks" Philadelphia, USA, 9 maggio 2016. Comunicazione orale su invito di G. McColm.
- {61} - "Periodic Structures and Crystal Chemistry." Rutgers University, Piscataway, USA. 10 maggio 2016. Seminario su invito di Jing Li.
- {62} - Workshop iPolymorphs: novel routes to inorganic polymorphs, "Carbon allotropes database", Donostia, Spagna, 23 giugno 2016. Comunicazione orale (keynote lecture) su invito.
- {63} - "Carbon allotropes database" Workshop iPolymorphs: novel routes to inorganic polymorphs Science. Donostia, Spain. 23 June 2016
- {64} - "Periodic structures and crystal chemistry" 2nd International Scientific Conference: Science of the future, Kazan, Russia. 20-23 September 2016
- {65} - "Hands on ToposPro" invited by Prof. Berend Smit at the Laboratory of Molecular Simulation LSMO, École Polytechnique Fédérale de Lausanne EPFL, Sion, Switzerland. 22 May 2017
- {66} - "Exploring structural space searching for carbon allotropes" ACNS'2017, 13th International Conference on Advanced Carbon NanoStructures, Saint Petersburg, Russia. July 3-7, 2017.
- {67} - "Exploring structural space searching for carbon allotropes" 254th National Meeting and Exposition of the American Chemical Society, Washington DC, USA. August 20-24, 2017
- {68} - "Topological characterization of coordination networks and MOFs" and "Hands on ToposPro" at IWSN-2017 International school for young researchers "Smart Nanomaterials" Rostov-on-Don, Russia. September 11-15, 2017
- {69} - "Perchè citiamo? L'etica delle citazioni e gli (ipotetici) allotropi del carbonio" Nanolab Talk, Dipartimento di Energia, Cesnef, Politecnico di Milano. 9 April 2018

ELENCO delle pubblicazioni qui citate (la numerazione corrisponde all'elenco completo reperibile ai siti sopra citati)

10. Mealli, C. and Proserpio, D.M., *MO THEORY MADE VISIBLE*. Journal of Chemical Education, 1990. **67**(5): p. 399-402. **837 citazioni**
22. Carlucci, L., Ciani, G., Proserpio, D.M., and Sironi, A., *Interpenetrating diamondoid frameworks of silver(i) cations linked by n,n'-bidentate molecular rods*. Journal of the Chemical Society-Chemical Communications, 1994(24): p. 2755-2756. **328 citazioni**
28. Carlucci, L., Ciani, G., Proserpio, D.M., and Sironi, A., *1-dimensional, 2-dimensional, and 3-dimensional polymeric frames in the coordination chemistry of agbf4 with pyrazine - the first example of 3 interpenetrating 3-dimensional triconnected nets*. Journal of the American Chemical Society, 1995. **117**(16): p. 4562-4569. **299 citazioni**
35. Carlucci, L., Ciani, G., Proserpio, D.M., and Sironi, A., *Novel networks of unusually coordinated silver(i) cations - the wafer-like structure of [Ag(py_z)₂][Ag₂(py_z)₅](PF₆)₃·2G and the simple cubic frame of Ag(py_z)₃(SbF₆)*. Angewandte Chemie-International Edition, 1995. **34**(17): p. 1895-1898. **285 cit.**
43. Carlucci, L., Ciani, G., Proserpio, D.M., and Sironi, A., *Extended networks via hydrogen bond cross-linkages of M(bipy) (M=Zn²⁺ or Fe²⁺; bipy=4,4'-bipyridyl) linear co-ordination polymers*. Journal of the Chemical Society-Dalton Transactions, 1997(11): p. 1801-1803. **219 citazioni**



48. Carlucci, L., Ciani, G., vonGudenberg, D.W., and Proserpio, D.M., *Self-assembly of infinite double helical and tubular coordination polymers from Ag(CF₃SO₃) and 1,3-bis(4-pyridyl)propane*. Inorganic Chemistry, 1997. **36**(18): p. 3812-3813. **281 citazioni**
54. Carlucci, L., Ciani, G., Macchi, P., and Proserpio, D.M., *An unprecedented triply interpenetrated chiral network of 'square-planar' metal centres from the self-assembly of copper(II) nitrate and 1,2-bis(4-pyridyl)ethyne*. Chemical Communications, 1998(17): p. 1837-1838. **240 citazioni**
65. Carlucci, L., Ciani, G., Macchi, P., Proserpio, D.M., and Rizzato, S., *Complex interwoven polymeric frames from the self-assembly of silver(I) cations and sebaconitrile*. Chemistry-a European Journal, 1999. **5**(1): p. 237-243. **255 citazioni**
75. Carlucci, L., Ciani, G., Moret, M., Proserpio, D.M., and Rizzato, S., *Polymeric layers catenated by ribbons of rings in a three-dimensional self-assembled architecture: A nanoporous network with spongelike behavior*. Angewandte Chemie-International Ed., 2000. **39**(8): p. 1506-1510. **352 citazioni**
88. Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *Borromean links and other non-conventional links in 'polycatenated' coordination polymers: re-examination of some puzzling networks*. Crystengcomm, 2003. **5**: p. 269-279. **341 citazioni**
92. Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *Polycatenation, polythreading and polyknottting in coordination network chemistry*. Coordination Chemistry Reviews, 2003. **246**: p. 247-289. **1792 cit.**
94. Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *A new type of entanglement involving one-dimensional ribbons of rings catenated to a three-dimensional network in the nanoporous structure of Co(bix)₂(H₂O)₂(SO₄).7H₂O bix=1,4-bis(imidazol-1-ylmethyl)benzene*. Chemical Communications, 2004(4): p. 380-381. **238 citazioni**
96. Blatov, V.A., Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *Interpenetrating metal-organic and inorganic 3D networks: a computer-aided systematic investigation. Part I. Analysis of the Cambridge structural database*. Crystengcomm, 2004. **6**: p. 377-395. **989 citazioni**
102. Baburin, I.A., Blatov, V.A., Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *Interpenetrating metal-organic and inorganic 3D networks: a computer-aided systematic investigation. Part II. Analysis of the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD)*. Journal of Solid State Chemistry, 2005. **178**(8): p. 2452-2474. **288 citazioni**
104. Delgado-Friedrichs, O., Foster, M.D., O'Keeffe, M., Proserpio, D.M., Treacy, M.M.J., and Yaghi, O.M., *What do we know about three-periodic nets?* Journal of Solid State Chemistry, 2005. **178**(8): p. 2533-2554. **176 citazioni**
109. Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *Networks, topologies, and entanglements*, in *Making Crystals by Design*, D. Braga and F. Grepioni, Editors. 2007, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. p. 58-85. **41 citazioni Google Scholar**
111. Blatov, V.A., Delgado-Friedrichs, O., O'Keeffe, M., and Proserpio, D.M., *Three-periodic nets and tilings: natural tilings for nets*. Acta Crystallographica Section A, 2007. **63**: p. 418-425. **121 citazioni**
118. Baburin, I.A., Blatov, V.A., Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *Interpenetrated three-dimensional hydrogen-bonded networks from metal-organic molecular and one- or two-dimensional polymeric motifs*. Crystengcomm, 2008. **10**(12): p. 1822-1838. **134 citazioni**
119. Baburin, I.A., Blatov, V.A., Carlucci, L., Ciani, G., and Proserpio, D.M., *Interpenetrated three-dimensional networks of hydrogen-bonded organic species: A systematic analysis of the Cambridge Structural Database*. Crystal Growth & Design, 2008. **8**(2): p. 519-539. **192 citazioni**
129. Blatov, V.A., Ilyushin, G.D., and Proserpio, D.M., *Nanocluster Model of Intermetallic Compounds with Giant Unit Cells: beta,beta'-Mg₂Al₃ Polymorphs*. Inorganic Chemistry, 2010. **49**: p. 1811-1818. **45 cit**
130. Anurova, N.A., Blatov, V.A., Ilyushin, G.D., and Proserpio, D.M., *Natural Tilings for Zeolite-Type Frameworks*. Journal of Physical Chemistry C, 2010. **114**(22): p. 10160-10170. **49 citazioni**
133. Proserpio, D.M., *TOPOLOGICAL CRYSTAL CHEMISTRY Polycatenation weaves a 3D web*. Nature Chemistry, 2010. **2**(6): p. 435-436. **54 citazioni**
134. Blatov, V.A., O'Keeffe, M., and Proserpio, D.M., *Vertex-, face-, point-, Schlafli-, and Delaney-symbols in nets, polyhedra and tilings: recommended terminology*. Crystengcomm, 2010. **12**(1): p. 44-48. **499 cit**
136. Blatov, V.A., Ilyushin, G.D., and Proserpio, D.M., *New Types of Multishell Nanoclusters with a Frank-Kasper Polyhedral Core in Intermetallics*. Inorganic Chemistry, 2011. **50**(12): p. 5714-5724. **26 cit.**
137. Blatov, V.A. and Proserpio, D.M., *Periodic-graph approaches in crystal structure prediction*, in *Modern Methods of Crystal Structure Prediction*, A.R. Oganov, Editor. 2011, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. p. 1-28. **191 citazioni Google Scholar**
141. Alexandrov, E.V., Blatov, V.A., Kochetkov, A.V., and Proserpio, D.M., *Underlying nets in three-*



- periodic coordination polymers: topology, taxonomy and prediction from a computer-aided analysis of the Cambridge Structural Database.* Crystengcomm, 2011. **13**(12): p. 3947-3958. **418 citazioni**
142. Kostakis, G.E., Blatov, V.A., and Proserpio, D.M., *A method for topological analysis of high nuclearity coordination clusters and its application to Mn coordination compounds.* Dalton Transactions, 2012. **41**(15): p. 4634-4640. **141 citazioni**
144. Kostakis, G.E., Perlepes, S.P., Blatov, V.A., Proserpio, D.M., and Powell, A.K., *High-nuclearity cobalt coordination clusters: Synthetic, topological and magnetic aspects.* Coordination Chemistry Reviews, 2012. **256**(11-12): p. 1246-1278. **94 citazioni**
150. Blatov, V.A., Ilyushin, G.D., and Proserpio, D.M., *The Zeolite Conundrum : Why Are There so Many Hypothetical Zeolites and so Few Observed? A Possible Answer from the Zeolite-Type Frameworks Perceived As Packings of Tiles.* Chemistry Of Materials, 2013. **25**(3): p. 412-424. **46 citazioni**
155. Pankova, A.A., Blatov, V.A., Ilyushin, G.D., and Proserpio, D.M., *γ -Brass Polyhedral Core in Intermetallics: The Nanocluster Model.* Inorganic Chemistry, 2013. **52**(22): p. 13094-13107. **26 cit.**
157. Wix, P., Kostakis, G.E., Blatov, V.A., Proserpio, D.M., Perlepes, S.P., and Powell, A.K., *A database of topological representations of polynuclear Nickel compounds.* European Journal Of Inorganic Chemistry, 2013. **2013**(4): p. 520-526. **10 citazioni**
159. Blatov, V.A., Shevchenko, A.P., and Proserpio, D.M., *Applied Topological Analysis of Crystal Structures with the Program Package ToposPro.* Crystal Growth & Design, 2014. **14**(7): p. 3576-3586. **904 citazioni**
160. Carlucci, L., Ciani, G., Proserpio, D.M., Mitina, T.G., and Blatov, V.A., *Entangled Two-Dimensional Coordination Networks: A General Survey.* Chemical Reviews, 2014. **114**(15): p. 7557-7580. **139 cit.**
164. Sikora, B.J., Winnegar, R., Proserpio, D.M., and Snurr, R.Q., *Textural Properties of a Large Collection of Computationally Constructed MOFs and Zeolites.* Microporous And Mesoporous Materials, 2014. **186**: p. 207-213. **16 citazioni**
165. Baburin, I.A., Proserpio, D.M., Saleev, V.A., and Shipilova, A.V., *From zeolite nets to sp^3 carbon allotropes: a topology-based multiscale theoretical study.* Physical Chemistry Chemical Physics, 2015. **17**(2): p. 1332-1338. **30 citazioni**
167. Pankova, A.A., Akhmetshina, T.G., Blatov, V.A., and Proserpio, D.M., *A collection of topological types of nanoclusters and its application to icosahedron-based intermetallics.* Inorganic Chemistry, 2015. **54**(13): p. 6616-6630. **15 citazioni**
170. Zeng, T., Hoffmann, R., Nesper, R., Ashcroft, N.W., Strobel, T.A., and Proserpio, D.M., *Li-filled, B-substituted carbon clathrates.* Journal Of The American Chemical Society, 2015. **137**(39): p. 12639-12652. **16 citazioni**
171. Hoffmann, R., Kabanov, A.A., Golov, A.A., and Proserpio, D.M., *Homo Citans and Carbon Allotropes: For an Ethics of Citation.* Angewandte Chemie (International edition), 2016. **55**(37): p. 10962-10976. **42 citazioni**
175. Zolotarev, P.N., Moret, M., Rizzato, S., and Proserpio, D.M., *Searching New Crystalline Substrates for OMBE : Topological and Energetic Aspects of Cleavable Organic Crystals.* Crystal Growth & Design, 2016. **16**(3): p. 1572-1582. **5 citazioni**

Data 30 gennaio 2019