

**FORMATO EUROPEO  
PER IL CURRICULUM  
VITAE**



**INFORMAZIONI PERSONALI**

Nome	<b>GRECO, Claudio</b>
Indirizzo di lavoro	<b>DIPARTIMENTO DI SCIENZE DELL'AMBIENTE E DELLA TERRA, UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO – BICOCCA PIAZZA DELLA SCIENZA 1, 20126, MILANO</b>
Telefono	<b>0264482098</b>
E-mail	<a href="mailto:claudio.greco@unimib.it"><b>claudio.greco@unimib.it</b></a>
Nazionalità	Italiana
Data di nascita	29 MAGGIO 1980

**ESPERIENZA PROFESSIONALE**

- Da dicembre 2021 **Professore ordinario (SSD CHIM/02 – CHIMICA FISICA)**  
Università degli Studi di Milano - Bicocca ([www.unimib.it](http://www.unimib.it))
- 2018-2021 **Professore associato (SSD CHIM/02 – CHIMICA FISICA)**  
Università degli Studi di Milano - Bicocca
- 2012-2017 **Ricercatore a tempo determinato (SSD CHIM/02 – CHIMICA FISICA)**  
Università degli Studi di Milano - Bicocca
- 2011-2012 **Junior research group leader (AG "THEORETICAL BIOINORGANIC CHEMISTRY")**  
Humboldt-Universität zu Berlin ([www.hu-berlin.de](http://www.hu-berlin.de))
- 2009-2011 **Assegnista di ricerca (SSD CHIM/03 – CHIMICA GENERALE E INORGANICA)**  
Università degli Studi di Milano - Bicocca
- 2008-2009 **Alexander von Humboldt research fellow (AVH RESEARCH AREA: THEORETICAL CHEMISTRY)**  
Humboldt-Universität zu Berlin
- 2008 **Borsista – CENTRO DI RICERCA COLLABORATIVA "ANALYSIS AND CONTROL OF ULTRAFAST PHOTOINDUCED REACTIONS"**  
Humboldt-Universität zu Berlin

**ISTRUZIONE E FORMAZIONE**

**Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche**  
Università degli Studi di Milano - Bicocca (sede del corso: Dipartimento di Scienza dei Materiali)

**Laura in Biotecnologie - ciclo unico**  
Università degli Studi di Milano - Bicocca (sede del corso: Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze) – laureato con lode

<p>MADRELINGUA</p> <p>ALTRE LINGUE</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacità di lettura</li> <li>• Capacità di scrittura</li> <li>• Capacità di espressione orale</li> </ul>	<p><b>ITALIANO</b></p> <p><b>INGLESE</b></p> <p>OTTIMA</p> <p>OTTIMA</p> <p>BUONA</p>
<p><b>ATTIVITÀ ISTITUZIONALI/GESTIONALI</b></p> <p>INCARICHI ORGANIZZATIVO – GESTIONALI</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Membro del Senato Accademico dell'Università degli Studi di Milano - Bicocca per il triennio accademico 2021-2024.</li> <li>- Membro del Presidio della Qualità dell'Università degli Studi di Milano - Bicocca per lo scorcio a.a. 2020/21 e per il triennio accademico 2021-2024.</li> <li>- Vicedirettore del Dipartimento di Scienze dell'Ambiente e della Terra dell'Università degli Studi di Milano - Bicocca da novembre 2019; conseguentemente, membro della Giunta di Dipartimento e membro del Management Board del Progetto di Eccellenza MIUR 2018-2022 in corso di svolgimento presso il medesimo Dipartimento.</li> <li>- Membro del Gruppo per l'Assicurazione della Qualità della Ricerca e della Terza Missione presso il Dipartimento di Scienze dell'Ambiente e della Terra dell'Università di Milano - Bicocca (Gennaio 2019 – in corso).</li> <li>- Membro della Cabina di Regia sull'Accreditamento dell'Università degli Studi di Milano - Bicocca (Rep. Decreti Rett. DA Dir. 355/2018; nomina comunicata il 22/1/18).</li> <li>- Assicuratore di Qualità del Corso di Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie Chimiche dell'Università di Milano - Bicocca (a.a. 2017/18 – in corso).</li> <li>- A partire da maggio 2014 e per il successivo quadriennio accademico, il prof. Greco è stato membro della Commissione per la stesura degli orari delle lezioni per il Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Chimiche dell'Università degli Studi di Milano - Bicocca. Inoltre, a partire dall'a.a. 2019/2020, è membro della Commissione Web per il medesimo Corso di Laurea.</li> <li>- Il prof. Greco è stato, fino all' a.a. 2016/17, componente della Commissione d'Area Disciplinare della Biblioteca di Ateneo - Area Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Milano - Bicocca (D.R. 0011232/14 del 26 marzo 2014).</li> <li>- Management Committee Member (substitute) per la COST action CM1205 "Catalytic Routines for Small Molecule Activation (CARISMA)", anni 2015-2017.</li> <li>- Membro del collegio docenti del Corso di Dottorato in Scienze Chimiche, Geologiche e Ambientali dell'Università degli Studi di Milano - Bicocca nei seguenti anni: 2014, 2015, 2016, 2018, 2019, 2020, 2021; per il medesimo Corso, il prof. Greco ha svolto in via informale il ruolo di responsabile del Curriculum di Scienze Chimiche nel corso degli aa.aa. 2018/2019 e 2019/2020.</li> </ul>
<p>ORGANIZZAZIONE - CONGRESSI, WORKSHOP E SCUOLE DI FORMAZIONE SCIENTIFICA</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Delegato della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale per l'organizzazione del XXVII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, tenutosi on-line nel settembre 2021.</li> <li>- Membro del Comitato Scientifico del "Virtual Symposium on Chemical Theory and Computation", tenutosi on-line nel dicembre 2020.</li> <li>- Co-direttore della Scuola Internazionale "Computational Spectroscopy: Bridging Theory and Experiment" (Lake Como School of Advanced Studies, Como, settembre 2018).</li> </ul>
<p>RESPONSABILITÀ SCIENTIFICA PER PROGETTI DI RICERCA</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Progetto di ricerca "Design, sviluppo e sintesi di radiofarmaci innovativi", finanziato da Regione Lombardia su bando 2019 ex art. 45 del D.Lgs. 81/2015.</li> <li>- Fondo di finanziamento per le attività base di ricerca (FFABR 2017); ente finanziatore: MIUR.</li> <li>- Progetto di ricerca su bando LISA Prod HPC CINECA (2016), intitolato: "Molecular simulation of water adsorption processes on particulate matter models". Granting organization: CINECA.</li> <li>- Progetto di ricerca su bando LISA Prod HPC CINECA (2014) intitolato: "Systematic ab-initio investigation of protein-imposed influence in [NiFe]-hydrogenase fragments". Granting organization: CINECA.</li> <li>- Progetto di ricerca "The interface between biochemistry, inorganic chemistry and computing to understand biological hydrogen production and CO<sub>2</sub> consumption", finanziato nel 2014 dall'IMÉRA – Institut d'études avances de l'Université d'Aix-Marseille (Marsiglia, Francia).</li> </ul>

	<p>- Progetto di ricerca intitolato: "A holistic QM/MM approach for the investigation of electronic and redox properties of methane oxygenases and hydrogenases", approvato nel 2011 da UniCat – Cluster of Excellence for Catalysis (Berlino, Germania).</p> <p>- Progetto di ricerca su bando ISCRA B HPC CINECA (2010) intitolato: "Protons and electrons transfer towards [FeFe]-hydrogenases active site models: fundamental hints for H<sub>2</sub> evolution catalysis". Granting organization: CINECA.</p>
<b>ATTIVITÀ SCIENTIFICA</b>	
AREA SCIENTIFICA	Chimica computazionale.
COMPETENZE SCIENTIFICHE	Modellistica molecolare di sistemi di interesse ambientale e biochimico/biomimetico
PRINCIPALI SETTORI DI RICERCA	<p>- Studio delle relazioni struttura-proprietà mediante metodologie teoriche quantistiche e/o ibride classico-quantistiche, con focus su sistemi catalitici per applicazioni di rilevanza ambientale (e.g. enzimi e catalizzatori bio-ispirati che promuovono l'ossidazione di CO, la riduzione di CO<sub>2</sub>, e l'ossidazione reversibile di H<sub>2</sub>).</p> <p>- Studio della biologia strutturale mediante metodologie bioinformatiche e di biofisica computazionale.</p>
SEMINARI E RELAZIONI SU INVITO	<p>- 20 comunicazioni orali, di cui 10 su invito o in qualità di keynote speaker, a congressi scientifici nazionali ed internazionali.</p> <p>- Attività seminariale su invito nell'ambito di brevi soggiorni di ricerca in atenei ed istituti di ricerca internazionali, come da elenco seguente: Max-Planck-Institute for Chemical Energy Conversion (già MPI for Bioinorganic Chemistry) di Muelheim an der Ruhr, Germania; 9 ottobre 2009; Università di Ginevra, Svizzera; 7 gennaio 2010; ETH Zurich, Zurigo, Svizzera; 16 febbraio 2010; Università di Potsdam, Germania; 2 giugno 2010; Università di Amburgo, Germania; 16 gennaio 2012; Università della Bretagna Occidentale, Francia; 5 luglio 2012; Università di Stoccolma, Svezia; 15 settembre 2016; Università di Lund, Svezia; 5 dicembre 2017; Technische Universitaet Berlin, Germania; 13 dicembre 2017; Humboldt-Universitaet zu Berlin, Germania; 22 gennaio 2020.</p>
PUBBLICAZIONI 2017-2021	<p>1) Breglia R.; Ruiz Rodriguez M.A.; Vitriolo A.; Gonzales Laredo R.F.; De Gioia L.; <u>Greco C.</u>; Bruschi M. (2017) "Theoretical insights into [NiFe]-hydrogenases oxidation resulting in a slowly reactivating inactive state"; <i>Journal of Biological Inorganic Chemistry</i>, 22:137-151.</p> <p>2) Breglia R.; Bruschi M.; Cosentino U.; De Gioia L.; <u>Greco C.*</u>; Miyake T.; Moro G. (2017) "A theoretical study on the reactivity of the Mo/Cu containing carbon monoxide dehydrogenase with dihydrogen"; <i>Protein Engineering, Design, and Selection</i>, 30:169-174.</p> <p>3) D'Arienzo M.; Gamba L.; Morazzoni F.; Cosentino U.; <u>Greco C.</u>; Lasagni M.; Pitea D.; Moro G.; Cepek C.; Butera V.; Sicilia E.; Russo N.; Munoz-Garcia A.B.; Pavone M. (2017) "Experimental and theoretical investigation on the catalytic generation of environmentally persistent free radicals from benzene"; <i>Journal of Physical Chemistry C</i>, 121:9381-9393.</p> <p>4) Cosentino U.*; <u>Greco C.*</u>; Pitea D.; Binetti S.; Le Donne A.; Moro G.; Baiardi A. (2017) "Theoretical and experimental investigation of UV-vis absorption spectrum in a Eu(3+) based complex for luminescent down shifting applications"; <i>Theoretical Chemistry Accounts</i>, 136:117.</p> <p>5) Monte-Perez I.; Kundu S.; Chandra A.; Craigo K.; Chernev P.; Kuhlmann U.; Dau H.; Hildebrandt P.; <u>Greco C.</u>; Van Stappen C.; Lehnert N.; Ray K. (2017) "Temperature dependence of the catalytic two- versus four-electron reduction of dioxygen by a hexanuclear cobalt complex"; <i>Journal of the American Chemical Society</i>, 139:15033-15042.</p> <p>6) Rovaletti A.; <u>Greco C.*</u> (2018) "Organophosphorous ligands in hydrogenase-inspired iron based catalysts: a DFT study on the energetics of metal protonation as a function of P-atom substitution"; <i>Journal of Physical Organic Chemistry</i>, 31:e3748.</p> <p>7) Del Barrio M.; Sensi M.; Fradale L.; Bruschi M.; <u>Greco C.</u>; de Gioia L.; Bertini L.; Fourmond V.; Leger C. (2018) "Interaction of the H-cluster of FeFe hydrogenase with halides"; <i>Journal of the American Chemical Society</i>, 140:5485-5492.</p>

- 8) Breglia R.; Greco C.; Fantucci P.; De Gioia L.; Bruschi M. (2018) "Theoretical investigation of aerobic and anaerobic oxidative inactivation of the [NiFe]-hydrogenase active site"; *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20:1693-1706.
- 9) Giorgetti S.; Greco C.; Tortora P.; Aprile F.A. (2018) "Targeting amyloid aggregation: an overview of strategies and mechanisms"; *International Journal of Molecular Sciences*, 19:e2677.
- 10) Breglia R.; De Gioia L.; Greco C.; Bruschi M. (2018) "Theory related to [FeFe]- and [NiFe]-hydrogenases: stereoelectronic properties, H-cluster oxidation, and mechanisms for increasing oxygen tolerance"; capitolo del libro 'Microalgal Hydrogen Production: Achievements and Perspectives'. G. Torzillo e M. Seibert Eds.; pubblicato dalla Royal Society of Chemistry.
- 11) Rovaletti, A.; Bruschi M.; Moro G.; Cosentino U. Greco C.\* (2019) "The challenging in silico description of CO-dehydrogenase activity in Mo-Cu carbon monoxide dehydrogenase"; *Frontiers in Chemistry*, 6:630.
- 12) Breglia R.; Greco C.; Fantucci P.; De Gioia L.; Bruschi M. (2019) "Reactivation of the ready and unready oxidized states of [NiFe]-hydrogenases: mechanistic insights from DFT calculations"; *Inorganic Chemistry*, 58:279-293.
- 13) Arrigoni F.; Bertini L.; Bruschi M.; Greco C.; De Gioia L.; Zampella G. (2019) "H<sub>2</sub> activation in [FeFe]-Hydrogenase cofactor versus diiron dithiolate models: factors underlying the catalytic success of nature and implications for an improved biomimicry"; *Chemistry - A European Journal*, 25:1227-1241.
- 14) Greco C.; Cosentino U.; Pitea D.; Moro G.; Santangelo S.; Patanè S.; D'Arienzo M.; Fiore M.; Morazzoni F.; Ruffo R. (2019) "Role of the carbon defects in the catalytic oxygen reduction by graphite nanoparticles: a spectromagnetic, electrochemical and computational integrated approach"; *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21:6021-6032.
- 15) Rovaletti A.; Bruschi M.; Moro G.; Cosentino U.; Ryde U.\*; Greco C.\* (2019) "A thiocarbonate sink on the enzymatic energy landscape of aerobic CO oxidation? Answers from DFT and QM/MM models of Mo-Cu CO-dehydrogenases"; *Journal of Catalysis*, 372:201-205.
- 16) Rovaletti A.; Bruschi M.; Moro G.; Cosentino U.; Greco C.\*; Ryde U.\* (2019) "Theoretical Insights into the Aerobic Hydrogenase Activity of Molybdenum-Copper CO Dehydrogenase"; *Inorganics*, 7:135.
- 17) Shimamura T.; Maeno Y.; Kubo K.; Kume S.; Greco C.; Mizuta T. (2019) "Protonation and Electrochemical Properties of Bisphosphide Diiron Hexacarbonyl Complex Bearing Amino Groups on the Phosphide Bridge"; *Dalton Transactions*, 48:16595-16603.
- 18) Caserta G.; Lorent C.; Ciaccafava A.; Keck M.; Breglia R.; Greco C.; Limberg C.; Hildebrandt P.; Cramer S.P.; Zebger I.; Lenz O. (2020) "The large subunit of the regulatory [NiFe]-hydrogenase from *Ralstonia eutropha* – A minimal hydrogenase?"; *Chemical Science*, 11:5453-5465.
- 19) Sala D.; Cosentino U.; Ranaudo A.; Greco C.\*; Moro G.\* (2020) "Dynamical Behavior and Conformational Selection Mechanism of the Intrinsically Disordered Sic1 Kinase-Inhibitor Domain"; *Life*, 10:110.
- 20) Arrigoni F.; Bertini L.; Breglia R.; Greco C.; De Gioia L.; Zampella G. (2020) "Catalytic H<sub>2</sub> Evolution/Oxidation in [FeFe]-Hydrogenase Biomimetics: Account from DFT on the Interplay of Related Issues and Proposed Solutions"; *New Journal of Chemistry*, 44:17596-17615.
- 21) Arrigoni F.; Rizza F.; Vertemara J.; Breglia R.; Greco C.; Bertini L.; Zampella G.; De Gioia L. (2020) "Rational design of Fe<sub>2</sub>(μ-PR<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(L)<sub>6</sub> coordination compounds featuring tailored potential inversion"; *ChemPhysChem*, 21:2279-2292.
- 22) Breglia R.; Arrigoni F.; Sensi M.; Greco C.\*; Fantucci P.; De Gioia L.\*; Bruschi M. (2021) "First- principles calculations on Ni,Fe-containing carbon monoxide dehydrogenases reveal key stereoelectronic features for binding and release of CO<sub>2</sub> to/from the C-cluster"; *Inorganic Chemistry*, 60:387402.
- 23) Rovaletti A.; Greco C.\*; Ryde U.\* (2021) "QM/MM study of the binding of H<sub>2</sub> to MoCu CO dehydrogenase: development and applications of improved H<sub>2</sub> van der Waals parameters"; *Journal of Molecular Modeling*, 27:68.
- 24) Arrigoni F.; Zampella G.; De Gioia L.; Greco C.\*; Bertini L.\* (2021) "The Photochemistry of Fe<sub>2</sub>(S<sub>2</sub>C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>)(CO)<sub>6</sub>(μ-CO) and its Oxidized Form, Two Simple [FeFe]-Hydrogenase CO-Inhibited Models. A DFT and TDDFT Investigation"; *Inorganics*, 9:16.
- 25) Hobballah A.; Arrigoni F.\*; Elleouet C.\*; Greco C.\*; Laurans M.; Petillon F.Y.; Schollhammer P.\* (2021) "Triiron clusters derived from dinuclear complexes related to the active site of [Fe-Fe] hydrogenases: Steric effect of the dithiolate bridge on redox properties, a DFT analysis"; *Inorganic Chemistry Frontiers*, 8:3659-3674.

## ULTERIORI INFORMAZIONI

PUBBLICAZIONI (TOTALE)	<ul style="list-style-type: none"><li>- 75 articoli scientifici in riviste internazionali con revisione tra pari (I.F. totale: 417,11; I.F. medio: 5,56).</li><li>- 4 Capitoli di libro.</li><li>- 3 articoli su periodici ufficiali di associazioni scientifiche nazionali (riviste non ISI, senza revisione tra pari).</li><li>- 2 pubblicazioni con finalità didattico-divulgativa o riguardanti questioni di didattica accademica (riviste non ISI, senza revisione tra pari).</li></ul>
H-INDEX (SCOPUS)	26
CITAZIONI TOTALI	1789 (31 DIC. 2021, SCOPUS)
INCARICHI EDITORIALI	Dal 2021, membro dell'Editorial Board della rivista scientifica "Catalysts" (MDPI, Svizzera).
ATTIVITÀ DI REVISIONE TRA PARI	<ul style="list-style-type: none"><li>- Reviewer per oltre 30 riviste scientifiche internazionali, tra le quali: Nature Catalysis, Nature Communications, Scientific Reports, Journal of the American Chemical Society, Journal of Catalysis.</li><li>- Reviewer di progetti di ricerca per conto del consorzio interuniversitario CINECA, e per i seguenti enti esteri e internazionali: US-Israel Binational Science Foundation; Croatian Science Foundation; Czech Science Foundation; Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding (Romania).</li></ul>
PARTECIPAZIONE IN SOCIETÀ SCIENTIFICHE	- Vicepresidente del Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (7 febbraio 2020 – in carica).
PREMI E RICONOSCIMENTI (SELEZIONE)	<ul style="list-style-type: none"><li>- Premio Carla Roetti 2019, conferito dalla Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana.</li><li>- Menzione Speciale del Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana nel contesto dell'edizione 2012 del Premio Eolo Scrocco.</li><li>- Alexander von Humboldt Research Fellowship (2007).</li></ul>

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali ai sensi del Decreto Legislativo 30 giugno 2003, n. 196 "Codice in materia di protezione dei dati personali".