

# FEDERICA ARRIGONI, *PhD* | Curriculum Vitae

**NAZIONALITÀ:** Italiana

**DATA DI NASCITA:** 29 giugno 1989

**LINGUE:** Italiano (madre lingua); Inglese (B2); Francese (Base)



## INFORMAZIONI GENERALI

---

### Posizione lavorativa attuale

**RTDA** (2021-presente)

Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/03

### Indirizzo

**Università degli studi di Milano-Bicocca**

Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Piazza della  
Scienza 2, 20126, Milano

### e-mail

[federica.arrigoni@unimib.it](mailto:federica.arrigoni@unimib.it)

### Homepage

<https://www.unimib.it/federica-arrigoni>

### ORCID ID

0000-0003-0691-7517

<https://orcid.org/0000-0003-0691-7517>

### Recapito Telefonico

02 6448 3475

02 6448 3473

## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

---

2003-2008

**Diploma**

Liceo Scientifico Antonio Banfi, Vimercate (MB)

Valutazione: 100/100

2008-2011

**Laurea Triennale in Scienze e Tecnologie Chimiche**

Università degli studi di Milano-Bicocca

Dipartimento di Scienze dei Materiali

Valutazione: 110/110 *cum laude*

Tesi: Funzionalizzazione di superfici di Si(100) con derivati ariltriazenici.

Relatore: prof. Dario Narducci

2011-2013

**Laurea Magistrale in Scienze e Tecnologie Chimiche**

Università degli studi di Milano-Bicocca

Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze

Valutazione: 110/110 *cum laude*

Tesi: Studio DFT della reattività delle [FeFe]-idrogenasi: dal sito attivo ai complessi biomimetici.

Relatore: prof. Luca De Gioia

2014-2016

**Dottorato di Ricerca in Scienze (curriculum chimico)**

Università degli studi di Milano-Bicocca

Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze

Tesi: Chemistry and renewable energy: DFT investigation on CO<sub>2</sub> reduction and H<sub>2</sub> oxidation/production catalyzed by transition metal biomimics.

Relatore: prof. Giuseppe Zampella

## ESPERIENZE LAVORATIVE

---

2014

**Tutoraggio didattico in Chimica Inorganica e Chimica Organica**

Università degli studi di Milano-Bicocca

Progetto di assistenza degli studenti con disabilità e DSA

2017-2018

**Assegno di ricerca**

Università degli studi di Milano-Bicocca

Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze

Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/03

2019-2021

**Assegno di ricerca**

Università degli studi di Milano-Bicocca  
Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze

Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/03

2021-presente

**RTDA**

Università degli studi di Milano-Bicocca  
Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze

Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/03

February-March 2021

**Visiting Researcher**

Università degli studi di Napoli Federico II

2013-2021

**Docenza a contratto**

Università degli studi di Milano-Bicocca

## ATTIVITÀ DIDATTICA PRESSO L'UNIVERSITÀ DI MILANO-BICOCCA

---

**A.A. 2014-2015**

- **Tutoraggio didattico in Chimica Inorganica e Chimica Organica**

Progetto di assistenza degli studenti con disabilità e DSA

- **Tutoraggio di laboratorio**

Piano Lauree Scientifiche (PLS), area Chimica, per esigenza del dipartimento di Scienze dell'Ambiente e del Territorio

---

**A.A. 2015-2016**

- **Tutoraggio di laboratorio di Chimica Generale**

Corso di laurea triennale in Scienze Biologiche (2 CFU)

- **Tutoraggio di laboratorio**

Piano Lauree Scientifiche (PLS), area Chimica, per esigenza del dipartimento di Scienze dell'Ambiente e del Territorio

---

**A.A. 2016-2017**

- **Tutoraggio di laboratorio di Chimica Generale**

Corso di laurea triennale in Scienze Biologiche (4 CFU)

- **Tutoraggio di laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica**

Corso di laurea triennale in Biotecnologie (6 CFU)

- **Tutoraggio di laboratorio**

Piano Lauree Scientifiche (PLS), area Chimica, per esigenza del dipartimento di Scienze dell'Ambiente e del Territorio

---

---

A.A. 2017-2018

- **Tutoraggio di laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica**  
Corso di laurea triennale in Biotecnologie (6 CFU)
- 

A.A. 2018-2019

- **Strumenti Computazionali per la Bioinformatica**  
Corso di laurea magistrale in Biotecnologie Industriali (6 CFU)
  - **Tutoraggio di laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica**  
Corso di laurea triennale in Biotecnologie (6 CFU)
  - **Tutoraggio di laboratorio**  
Piano Lauree Scientifiche (PLS), area Chimica, per esigenza del dipartimento di Scienze dell'Ambiente e del Territorio
- 

A.A. 2020-2021

- **Tutoraggio di laboratorio**  
Piano Lauree Scientifiche (PLS), area Chimica, per esigenza del dipartimento di Scienze dell'Ambiente e del Territorio
- 

A.A. 2019-presente

- **Strumenti Computazionali per la Bioinformatica**  
Corso di laurea magistrale in Biotecnologie Industriali (6 CFU)

---

## SUPERVISIONE TESI LAUREA TRIENNALE E MAGISTRALE

---

A.A. 2017-2018

**Correlatrice** di tesi di laurea magistrale di Chiara Di Carlo in Scienze e Tecnologie Chimiche dal titolo: *Reattività di modelli del complesso Cu(II)-Aβ nell'abito della malattia di Alzheimer: studio DFT della riduzione del superossido a perossido di idrogeno.*

A.A. 2018-2019

**Relatrice** di tesi di laurea triennale di Matteo Gandini in Scienze e Tecnologie Chimiche dal titolo: *Riduzione bieletronica di complessi con scaffold Fe<sub>2</sub>P<sub>2</sub> biomimetici delle [FeFe]-idrogenasi: analisi DFT sulla modulazione dell'inversione di potenziale.*

A.A. 2019-2020

**Correlatrice** di tesi di laurea triennale di Nicolò Giulini in Scienze e Tecnologie Chimiche dal titolo: *Indagine preliminare sugli ingredienti stereoelettronici alla base del fenomeno della biforcazione elettronica.*

**Correlatrice** di tesi di laurea triennale di Nathascia Amoruso in Scienze e Tecnologie Chimiche dal titolo: *Studio delle proprietà stereoelettroniche di sistemi molecolari in grado di effettuare Biforcazione Elettronica.*

**Relatrice** di tesi di laurea magistrale di Francesco Santoro in Biotecnologie Industriali dal titolo: *Studio computazionale sui determinanti molecolari alla base della diversa reattività di V- e Mo-nitrogenasi.*

**Relatrice** di tesi di laurea magistrale di Luca Toniatti in Scienze Biologiche dal titolo: *Dissertazione sull'origine della differente capacità catalitica delle diverse varianti di nitrogenasi nei processi di riduzione dei substrati: uno studio in silico tramite la teoria del funzionale della densità.*

**Relatrice** di tesi di laurea magistrale di Fabio Boiocchi in Biotecnologie Industriali dal titolo: *Studio computazionale sul ruolo dei ligandi pterinici nella modulazione del potenziale redox del sito attivo delle Mo-proteine.*

## A.A. 2020-2021

**Correlatrice** di tesi di laurea magistrale di Alessandro Pepe in Scienze e Tecnologie Chimiche dal titolo: *Indagine preliminare sugli ingredienti stereoelettronici alla base del fenomeno della biforcazione elettronica.*

**Correlatrice** di tesi di laurea magistrale di Edoardo Viganò in Scienze e Tecnologie Chimiche dal titolo: *Studio delle proprietà stereoelettroniche di sistemi molecolari in grado di effettuare Biforcazione Elettronica.*

**Relatrice** di tesi di laurea magistrale di Alessandro Currà in Scienze Biologiche dal titolo: *Studio computazionale sui determinanti molecolari alla base della diversa reattività di V- e Mo-nitrogenasi.*

**Relatrice** di tesi di laurea magistrale di Giuseppe Silvestri in Biotecnologie Industriali dal titolo: *Dissertazione sull'origine della differente capacità catalitica delle diverse varianti di nitrogenasi nei processi di riduzione dei substrati: uno studio in silico tramite la teoria del funzionale della densità.*

## INCARICHI ISTITUZIONALI

---

### 2019

**Membro commissione giudicatrice per l'esame finale di Dottorato di Ricerca** di Andrea Mele, presso UMR CNRS 6521 "Chimie, Electrochimie Moleculaires et Chimie Analytique", Università della Bretagna Occidentale, Brest (Francia). Titolo: *Contribution à la chimie de complexes dinucléaires du fer, possédant des ligands redox, inspirés du site actif des hydrogénases [FeFe].*

## PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

---

- S. Sicolo, M. Bruschi, L. Bertini, G. Zampella, G. Filippi, **F. Arrigoni**, L. De Gioia, C. Greco, Towards Biomimetic Models of the Reduced [FeFe]-Hydrogenase that Preserve the Key Structural Features of the Enzyme Active Site: a DFT Investigation. *Int. J. Hydrogen Energy*, **2014**, 39,18565-73.
- G. Filippi, **F. Arrigoni**, L. Bertini, L. De Gioia, G. Zampella, DFT Dissection of the Reduction Step in H<sub>2</sub> Catalytic Production by [FeFe]-Hydrogenase-Inspired Models: Can the Bridging Hydride Become More Reactive Than the Terminal Isomer? *Inorg. Chem.*, **2015**, 54, 9529-42.
- X. Zhou, B. E. Barton, **F. Arrigoni**, G. Zampella, T. B. Rauchfuss. Preparation and Protonation of Fe<sub>2</sub>(pdt)(CNR)<sub>6</sub>, Electron-Rich Analogues of Fe<sub>2</sub>(pdt)(CO)<sub>6</sub>. *Inorg. Chem.*, **2016**, 55 (7), 3401-12.
- G. M. Chambres, **F. Arrigoni**, G. Zampella, T. B. Rauchfuss, Effect of Pyramidalization of the M<sub>2</sub>(SR)<sub>2</sub> Center: The Case of (C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>Ni<sub>2</sub>(SR)<sub>2</sub>. *Organometallics*, **2016**, 35 (5), 836-46.

- M. Bruschi, R. Breglia, **F. Arrigoni**, P. Fantucci, L. De Gioia, Computational Approaches to the Prediction of the Redox Potentials of Iron and Copper Bioinorganic Systems. *Int. J. Quantum Chem.*, **2016**, 116, 1695-1705.
- W. Chu, C. P. Richers, E. R. Kahle, T. B. Rauchfuss, **F. Arrigoni**, G. Zampella, Imine-Centered Reactions in Imino-Phosphine Complexes of Iron Carbonyls. *Organometallics*, **2016**, 35, 2782–92.
- **F. Arrigoni**, S. M. Bouh, L. De Gioia, C. Elleouet, F. Y. Petillon, P. Schollhammer, G. Zampella, Influence of the Dithiolate Bridge on the Oxidative Processes of Diiron Models Related to the Active Site of [FeFe] Hydrogenases. *Chem. – Eur. J.*, **2017**, 23 (18), 1-10.
- **F. Arrigoni**, L. Bertini, L. De Gioia, A. Cingolani, R. Mazzoni, G. Zampella, Mechanistic Insight into Electrocatalytic H<sub>2</sub> Production by [Fe<sub>2</sub>(CN){μ-CN(Me)<sub>2</sub>}(μ-CO)(CO)(Cp)<sub>2</sub>]: Effects of Dithiolate Replacement in [FeFe] Hydrogenase Models. *Inorg. Chem.*, **2017**, 56 (22), 13852-64.
- L. Bertini, M. E. Alberto, **F. Arrigoni**, J. Vertemara, P. Fantucci, M. Bruschi, G. Zampella, L. De Gioia, On the Photochemistry of Fe<sub>2</sub>(edt)(CO)<sub>4</sub>(PMe<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, a [FeFe]-Hydrogenase model. A DFT/TDDFT Investigation. *Int. J. Quantum Chem.*, **2018**, 118 (9), Article Number e25537.
- Q. Li, N. Lalaoui, T. J. Woods, T. B. Rauchfuss, **F. Arrigoni**, G. Zampella, Electron-Rich, Diiron Bis(monothiolato) Carbonyls: C-S Bond Homolysis in a Mixed Valence Diiron Dithiolate. *Inorg. Chem.*, **2018**, 57 (8), 4409-18.
- **F. Arrigoni**, S. Mohamed Bouh, C. Elleouet, F. Y. Pétilon, P. Schollhammer, L. De Gioia, G. Zampella, Electrochemical and Theoretical Investigations of the Oxidatively Induced Reactivity of the Complex [Fe<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>(k<sup>2</sup>-dmpe)(μ-adtBn)] Related to the Active Site of [FeFe]-Hydrogenases. *Chem. – Eur. J.*, **2018**, 24 (56), 15036-51.
- **F. Arrigoni**, T. Prosdocimi, L. Mollica, G. Zampella, L. De Gioia, L. Bertini, Copper Reduction and Dioxygen Activation in Cu-Amyloid Beta Peptide Complexes. Insight from Molecular Modelling. *Metallomics*, **2018**, 10 (11), 1618-30.
- **F. Arrigoni**, L. Bertini, M. Bruschi, C. Greco, L. De Gioia, G. Zampella, H<sub>2</sub> Activation in [FeFe]-Hydrogenases Cofactor vs Fe<sub>2</sub>S<sub>2</sub> models: Factors Underlying the Catalytic Success of Nature and Implications for Improved Biomimicry. *Chem. – Eur. J.*, **2019**, 25 (5), 1227-41.
- D. Basu, T.S. Bailey, N. Lalaoui, C. P. Richers, T. J. Woods, T.B. Rauchfuss, **F. Arrigoni**, G. Zampella, Synthetic Designs and Structural Investigations of Biomimetic Ni-Fe Thiolates. *Inorg. Chem.*, **2019**, 58 (4), 2430-43.
- **F. Arrigoni**, R. Breglia, M. Bruschi, P. Fantucci, L. De Gioia, The Redox Potentials of Small Inorganic Radicals and Hexa-aquo Complexes of First Row Transition Metals in Water. A DFT Study Based on the Grand Canonical Ensemble. *J. Phys. Chem. A*, **2019**, 123 (32), 6948-57.
- **F. Arrigoni**, R. Mazzoni, L. Bertini, A. Cingolani, L. De Gioia, I. Gualandi, D. Tonelli, V. Zanotti, G. Zampella, On the Importance of Cyanide in Diiron Bridging Carbyne Complexes, Unconventional [FeFe]-Hydrogenase Mimics Without Dithiolate: An Electrochemical and DFT Investigation. *Inorg. Chim. Acta.*, **2020**, 510, 119745.

- **F. Arrigoni**, F. Rizza, R. Tisi, L. De Gioia, G. Zampella, L. Bertini, On the Propagation of the OH Radical Produced by Cu-Amyloid Beta Peptide Model Complexes. Insight from Molecular Modelling. *Metallomics*. **2020**, 12(11), 1765–1780.
- **F. Arrigoni\***, F. Rizza, J. Vertemara, R. Breglia, L. Bertini, C. Greco, G. Zampella, L. De Gioia, Towards the Design of Electron Bifurcating Molecular Devices: Tuning Potential Inversion in  $\text{Fe}_2(\mu\text{-PR}_2)_2(\text{L})_6$  Coordination Compounds. *ChemPhysChem*, **2020**, 21 (20), 2279-92.
- **F. Arrigoni\***, L. Bertini, R. Breglia, C. Greco, L. De Gioia, G. Zampella, Dihydrogen Evolution/Oxidation in [FeFe]-Hydrogenase Biomimetics: Accounts from DFT on the Interplay of Related Issues and Possible Solutions. *New J. Chem, (invited contribution)*, **2020**, 44(41), 17596–17615.
- **F. Arrigoni**, A. Mele, C. Elleouet, F.Y. Pétilion, L. De Gioia, G. Zampella, P. Schollhammer, Insights into the Two-Electron Reductive Process of [FeFe]H<sub>2</sub>ase Biomimetics. Cyclic Voltammetry and DFT Investigation on Chelates Control of Redox Properties of [Fe<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>(κ<sup>2</sup>-chelate)(μ-dithiolate)]. *Chem. – Eur. J.*, **2020**, 26 (72), 17536–17545.
- R. Breglia, **F. Arrigoni**, M. Sensi, C. Greco, P. Fantucci, L. De Gioia, M. Bruschi, 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, *Inorg. Chem.* **2021**, 60, 387–402.
- A. D’Aloia,<sup>‡</sup> **F. Arrigoni**,<sup>‡</sup> R. Tisi, A. Palmioli, M. Ceriani, V. Artusa, C. Airoidi, G. Zampella, B. Costa, L. Cipolla, Synthesis, Molecular Modeling and Biological Evaluation of Metabolically Stable Analogues of the Endogenous Fatty Acid Amide Palmitoylethanolamide. *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, 21(23),1–25
- D. Forni, R. Cagliani, **F. Arrigoni**, M. Benvenuti, A. Mozzi, U. Pozzoli, M. Clerici, M. Sironi, L. De Gioia. Adaptation of the endemic coronaviruses HCoV-OC43 and HCoV-229E to the human host, *Virus Evol.* **2021**, 7 (2), A1353.
- **F. Arrigoni**, G. Zampella, L. Bertini, C. Greco, L. De Gioia. The photochemistry of  $\text{Fe}_2(\text{S}_2\text{C}_3\text{H}_6)(\text{CO})_6(\mu\text{-CO})$  and its oxidized form, two simple [FeFe]-hydrogenase co-inhibited models. a DFT and TDDFT investigation. *Inorganics*, **2021**, 9(2), 1–17.
- **F. Arrigoni**, G. Zampella, F. Zhang, H.N. Kagalwala, Q.-L. Li, T.J. Woods, T.B Rauchfuss. Computational and Experimental Investigations of the  $\text{Fe}_2(\mu\text{-S}_2)/\text{Fe}_2(\mu\text{-S})_2$  Equilibrium. *Inorg Chem*, **2021**, 60(6), 3917–3926.
- F. Zhang, T.J. Woods, T.B Rauchfuss, **F. Arrigoni**, G. Zampella. CO substitution by PPh<sub>3</sub> in  $\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{CO})_6$  proceeds via a novel Fe<sub>2</sub>S intermediate. *Chem. Commun.* **2021**, 57(41), 5079–5081.
- L. R. Almazahreh,<sup>‡</sup> **F. Arrigoni**,<sup>‡</sup> H. Abul-Futouh, M. El-Khateeb, H. Görls, C. Elleouet, P. Schollhammer L. Bertini, L. De Gioia, M. Rudolph G. Zampella, W. Weigand. Proton Shuttle Mediated by (SCH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>P=O Moiety in [FeFe]-Hydrogenase Mimics: Electrochemical and DFT Studies. *ACS Catalysis*, **2021**, 11(12), 7080–7098.
- A. Hobballah, **F. Arrigoni**,\* C. Elleouet, C. Greco, M. Laurans, F. Pétilion, P. Schollhammer. 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. *Inorg. Chem. Front.* **2021**, 8(15), 3659–3674.
- C. Felbek, **F. Arrigoni**, D. de Sancho, A. Jacq-Bailly, R.B. Best, V. Fourmond, L. Bertini, C. Léger. Mechanism of Hydrogen Sulfide-Dependent Inhibition of FeFe Hydrogenase. *ACS catal.* **2021**, 11(24), 15162–15176.

- D. Basu, D. Gray, T.J. Woods, T.B. Rauchfuss, **F. Arrigoni**, G. Zampella. Challenges in the Synthesis of Active Site Mimics for [NiFe]-Hydrogenases. *Organometallics*, **2021**, 40(19), 3306–3312.
- **F. Arrigoni**,\* A. Rovaletti, L. Bertini, R. Breglia, L. De Gioia, J. Vertemara, G. Zampella, P. Fantucci. Investigations of the electronic-molecular structure of bio-inorganic systems using modern methods of quantum chemistry, *Inorganica Chimica Acta*, **2022**, 532, 120728.
- **F. Arrigoni**,\* F. Rizza, L. Bertini, L. De Gioia, G. Zampella. Toward diiron dithiolato biomimetics with rotated conformation of the [FeFe]-hydrogenase active site: a DFT case study on electron rich isocyanide based scaffolds. *Accepted in Eur. J. Inorg. Chem.*
- L. Chatelain, J.-B. Breton, **F. Arrigoni**,\* P. Schollhammer, G. Zampella. Geometrical Influence on Non-Biomimetic Heterolytic Splitting of H<sub>2</sub> by Bio-Inspired [FeFe]-Hydrogenase Complexes: a rare example of inverted Frustrated Lewis Pair based reactivity. *Accepted in Chem. Sci.*
- E. Perciballi, F. Bovio, J. Rosati, **F. Arrigoni**, A. D’Anzi, S. Lattante, M. Gelati, F. De Marchi, I. Lombardi, G. Ruotolo, M. Forcella, L. Mazzini, S. D’Alfonso, L. Corrado, M. Sabatelli, A. Conte, L. De Gioia, S. Martino, A. L. Vescovi, P. Fusi, D. Ferrari. Characterization of the p.L145F and p.S135N mutations in SOD1: impact on fibroblasts’ metabolism of Amyotrophic Lateral Sclerosis patients. *Submitted to Antioxidants.*
- R. Rotem, M. Giustra, **F. Arrigoni**, J. A. Bartolini, S. Garbujo, M. Rizzuto, L. Salvioni, L. Bertini, L. De Gioia, M. Colombo, D. Prospero, Limitations of commonly used surfactants and advantages of multidentate ligands for stabilization and functionalization of inorganic nanoparticles. *Submitted to Journal of Colloid And Interface Science.*
- F. Arrigoni, C. Di Carlo, A. Rovetta, L. De Gioia, G. Zampella, L. Bertini. Superoxide reduction by Cu-Amyloid Beta peptide complexes. A Density Functional Theory study. *Accepted in Eur. J. Inorg. Chem.*

---

### Note

\* Corresponding author

‡ Primo nome multiplo

Il numero di citazioni riportato è stato filtrato dai risultati di Google Scholar.

---

### Statistiche

n. pubblicazioni	33	
+ submitted	36	
H-Index	11	(Google Scholar)
Citazioni	272	(Google Scholar)

---

## PARTECIPAZIONE A SCUOLE, WORKSHOP E CONGRESSI

---

*Scuole e workshop formativi*



- XIX Scuola Nazionale di Chimica Inorganica per dottorandi (22-24/10/2014) \_ Pisa, Italia. **POSTER** dal titolo: *On the reactivity of the most efficient iron based catalyst for CO<sub>2</sub> hydrogenation: a DFT picture.*
- Summer School "Spectroscopy of Spin in Catalysis, Bioinorganic and Materials Chemistry: spinning a web of theory and practice" (4-10/7/2015) \_ Groningen, Olanda. **POSTER** dal titolo: *DFT investigation of [FeFe]-hydrogenases and biomimetic models: implications on the activation of H<sub>2</sub>.*
- 10<sup>th</sup> International School of Organometallic Chemistry (5-9/9/2015) \_ Camerino, Italia. **POSTER** dal titolo: *DFT investigation of [FeFe]-hydrogenases and biomimetic models: implications on the activation of H<sub>2</sub>.*
- CNRS Summer School METBIO "Methods for studying metals in biology" (17-21/9/2017) \_ Marsiglia, Francia. **POSTER** dal titolo: *Comparison of H<sub>2</sub> oxidation in [FeFe]-hydrogenases and biomimetic models highlights key stereoelectronic features for catalysis.*

---

### *Congressi nazionali ed internazionali in qualità di relatrice*

- III Workshop "Computational methods for chemical and biochemical processes" (24-27/9/2013) \_ Vignale Monferrato, Italia. **TALK** dal titolo: *DFT investigation of binding and redox properties of the H<sub>ox</sub> state of [FeFe]-hydrogenase and bioinspired complexes.*
- IV workshop "Computational methods for chemical and biochemical processes" (16-18/9/2015) \_ Vignale Monferrato, Italia. **TALK** dal titolo: *Comparison of H<sub>2</sub> oxidation in [FeFe]-hydrogenases and biomimetic models highlights key stereoelectronic features for catalysis.*
- EuCheMS International Organometallic Conference XXII (9-12/8/2017) \_ Amsterdam, Olanda. **TALK** dal titolo: *Comparison of H<sub>2</sub> oxidation in [FeFe]-hydrogenases and biomimetic models highlights key stereoelectronic features for catalysis.*
- ECOSTBio Seventh scientific workshop (14-15/12/2017) \_ Dublino, Irlanda. **TALK** dal titolo: *DFT study of CO<sub>2</sub> activation promoted by a class of thiolate-bridged di-iron complexes with a [Cp\*Fe(μ-SR)<sub>2</sub>FeCp\*] scaffold.*
- Workshop "I Chimici per le biotecnologie" (23/2/2018) \_ Bologna, Italia. **TALK** dal titolo: *Quantum Chemistry serving biotechnologies: the interesting case of metalloenzyme active sites.*
- 28<sup>th</sup> International Conference on Organometallic Chemistry (15-20/7/2018) \_ Firenze, Italia. **TALK** dal titolo: *Beyond the iron-dithiolate mimic paradigm: new insight into the mechanism of electrocatalytic H<sub>2</sub> production with μ-carbyne diiron complexes.*
- 12<sup>th</sup> international Hydrogenases Conference (31/3/2019-4/4/2019) \_ Lisbona, Portogallo. **TALK (invited)** dal titolo: *H<sub>2</sub> oxidation and proton reduction in [FeFe]-hydrogenase biomimetics: looking backwards and forwards for new synthetic mimics. The DFT viewpoint.*
- 5<sup>th</sup> EuChemS Inorganic Chemistry Conference (24/6/2019-28/6/2019) \_ Mosca, Russia. **TALK** dal titolo: *H<sub>2</sub> oxidation and proton reduction in [FeFe]-hydrogenase biomimetics: looking backwards and forwards for new synthetic mimics. The DFT viewpoint*

---

### *Congressi nazionali ed internazionali*

- 10<sup>th</sup> international Hydrogenases *Conference* (8-12/7/2013) \_ Seghedino, Ungheria. **POSTER** dal titolo: *DFT investigation of binding and redox properties of the H<sub>ox</sub> state of [FeFe]-hydrogenase and bioinspired complexes.*
- International workshop "Interface between experimental and theoretical approaches to energy-related enzyme catalysis" (4-6/6/2014) \_ Londra, UK. **POSTER** dal titolo: *On the reactivity of the most efficient iron based catalyst for CO<sub>2</sub> hydrogenation: a DFT picture.*
- Horizon Chem 2014 "Towards Horizon 2020 scientific excellence: new challenges for chemistry" (24/1/2014) \_ Milano, Italia.
- Horizon Chem 2015 "Le sfide di Horizon2020 per la chimica moderna: salute ed energia, affrontare i sistemi complessi con metodi computazionali" (6/3/2015) \_ Milano, Italia.

## PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

---

**2015**

**Grant** per la partecipazione a "10<sup>th</sup> International School of Organometallic Chemistry" (5-9/9/2015) \_ Camerino, Italia.

**Grant** per la partecipazione alla Summer School "Spectroscopy of Spin in Catalysis, Bioinorganic and Materials Chemistry: spinning a web of theory and practice" (4-10/7/2015) \_ Groningen, Olanda.

**Poster Prize Award**, con poster dal titolo: *DFT investigation of [FeFe]-hydrogenases and biomimetic models: implications on the activation of H<sub>2</sub>*, presentato a "Spectroscopy of Spin in Catalysis, Bioinorganic and Materials Chemistry: spinning a web of theory and practice" (4-10/7/2015) \_ Groningen, Olanda.

**2018**

**Premio Giovani Talenti dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca, Edizione 2018**, con il patrocinio dell'Accademia del Lincei, Ambito 3, AREA -03- SCIENZE CHIMICHE + AREA -04- SCIENZE DELLA TERRA, secondo posto.

**Poster Prize Award**, con poster dal titolo: *Computational drug design: the case of potential new analogues of palmitoylethanolamide (PEA) for neuroprotective and anti-inflammatory treatment of Alzheimer disease*, presentato a "Kick-off meeting" (21/11/2018) del Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Università di Milano-Bicocca\_ Milano, Italia.

**2019**

**Cover Feature** "*H<sub>2</sub> Activation in [FeFe]-Hydrogenases Cofactor vs Fe<sub>2</sub>S<sub>2</sub> models: Factors Underlying the Catalytic Success of Nature and Implications for Improved Biomimicry*" F. Arrigoni, L. Bertini, M. Bruschi, C. Greco, L. De Gioia, G. Zampella, CHEM. – EUR. J., **2019**, 25 (5),1114.

**2020**

**Premio Giovani Talenti dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca, Edizione 2020**, con il patrocinio dell'Accademia del Lincei, Ambito 3, AREA -03- SCIENZE CHIMICHE + AREA -04- SCIENZE DELLA TERRA, terzo posto.

2021

Premio Giovani Talenti dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca, Edizione 2020, con il patrocinio dell'Accademia del Lincei, Ambito 3, AREA -03- SCIENZE CHIMICHE + AREA -04- SCIENZE DELLA TERRA, secondo posto.

2021

Cover Feature "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" A. Hobballah, F. Arrigoni, C. Elleouet, C. Greco, M. Laurans, F. Pétilion, P. Schollhammer. INORG. CHEM. FRONT., 2021.

## CONFERIMENTO INCARICHI NELL'AMBITO DI PROGETTI DI RICERCA

---

- **Collaborazione per attività di ricerca "Borsa Giovani Promettenti"**, progetto dal titolo: *Studio computazionale delle relazioni struttura-attività in metalloproteine e loro complessi biomimetici*, Resp. Luca De Gioia, CHIM/03 (3/2014-6/2014) \_ Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Università di Milano-Bicocca\_ Milano, Italia.
- **Collaborazione per attività di ricerca**, progetto dal titolo: *Studio computazionale dell'interazione tra molecole e peptidi coinvolti in processi neurodegenerativi e vescicole extracellulari*, nell'ambito dei [Fondi Progetto MINER Cariplo-Regione Lombardia](#), Resp. Davide Proserpi, BIO/10 (7/2014-6/2015) \_ Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Università di Milano-Bicocca\_ Milano, Italia.
- **Collaborazione per attività di ricerca**, progetto dal titolo: *Studio computazionale delle relazioni struttura-attività in metalloproteine e complessi biomimetici di rilevanza biomedica ed energetico-ambientale*, Resp. Luca De Gioia, CHIM/03 (7/2015-12/2015) \_ Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze, Università di Milano-Bicocca\_ Milano, Italia.

## ATTIVITÀ DA REVIEWER PER RIVISTE SCIENTIFICHE INTERNAZIONALI

---

- **Reviewer per ACS**  
Inorganic Chemistry
- **Reviewer per Wiley-VCH**  
ChemSusChem, ChemCatChem, EurJIC
- **Reviewer per Nature Chemistry**

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del D.P.R. 445/2000.