

Dott. Giuseppe Pellicane (PhD)

Nato a Pavia, Italia, il 10/10/1971.

Cittadinanza italiana. Residente permanente del Sud Africa dal giugno 2011.

### **POSIZIONI PERMANENTI RICOPERTE**

*01 January 2018- current*

*Associate Professor* (equipollente a Professore Associato in Italia in accordo alla tabella allegata al D.M. Università e Ricerca dell' 1 settembre 2016, n. 662), School of Chemistry and Physics, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

*1 Gennaio 2013 – 31 December 2017*

*Senior Lecturer* (equipollente a Professore Associato in Italia in accordo alla tabella allegata al D.M. Università e Ricerca del 2 maggio 2011, n. 236/2011), School of Chemistry and Physics, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

*1 Gennaio 2011 – 31 Dicembre 2012*

*Lecturer*, School of Chemistry and Physics, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

### **ASSOCIAZIONI NEL CAMPO DELLA RICERCA E METRICA**

Abilitazione scientifica nazionale docente universitario di seconda fascia in Italia, nel settore 02/B2 (fisica teorica della materia), valida dal 26/07/2017 al 26/07/2023.

Membro ordinario del Istituto Nazionale di Fisica Teorica (NITheP), Sud Africa.

Membro ordinario della Società Sudafricana di Fisica (SAIP).

Membro del Comitato Editoriale della rivista *Journal Applied Mathematics*, Hindawi (<https://www.hindawi.com/journals/jam/>).

Rating della Fondazione Nazionale di Ricerca (NRF) del Sud Africa: C1 per il periodo 2012-2017; C1 per il periodo 2018-2023 (“Tutti i revisori sono fermamente convinti che il candidato è un ricercatore consolidato – I ricercatori consolidati posseggono una produzione scientifica recente sostenuta di prodotti di ricerca nel loro settore di specializzazione, la quale è riconosciuta dai loro colleghi essere di qualità, coerente ed attestante la loro attività continua nel tempo nell’ambito del settore medesimo – e che, sulla base della alta qualità e dell’impatto della sua ricerca recente è considerato, da alcuni revisori, godere di considerevole riconoscimento internazionale”)

h-index (indice di Hirsch): 19.

### **SERVIZIO MILITARE**

*Luglio -Novembre 1996*

Allievo ufficiale dell' esercito italiano, arma di Fanteria.

*Dicembre 1996 – Ottobre 1997*

Ufficiale di complemento dell' esercito italiano, arma di Fanteria.

## **EDUCAZIONE**

*9 Giugno 2006*

Diploma di specializzazione nell' insegnamento secondario della Matematica e Fisica (classe di concorso A049) conseguito presso l'Università di Messina, Italia. Voto: 79/80

*25 Maggio 2002*

Diploma di specializzazione nell' insegnamento secondario della Fisica (classe di concorso A038) conseguito presso l'Università di Messina, Italia. Voto: 78/80

*26 Febbraio 2001*

Dottore di ricerca in Fisica.

Università degli studi di Messina (Italia).

*19 Marzo 1996*

Laurea quadriennale in Fisica

Università degli studi di Messina (Italia). Voto: 110/110 e lode.

## **TRAINING DI RICERCA**

*27-7 Agosto/Settembre 2007*

“Scuola estiva di calcolo avanzato”

Scuola CASPUR, Villa Florio, Grottaferrata, Roma, Italia.

*1-5 Marzo 2004*

“Tutorial PWscf su proprietà elettroniche, strutturali e dinamiche di materiali”

CINECA, Bologna, Italia.

*6-13 dicembre 2001*

“The Nuts and Bolts of First Principles Simulation”

Sviluppatori del pacchetto CASTEP, Durham, Regno Unito.

*10-21 Settembre 2001*

Scuola estiva su "functional density theory"

Caramulo, Portogallo.

*10-21 September 2001*

"Scuola estiva di Calcolo Parallelo"

CINECA school, Bologna, Italy.

*18-27 Giugno 2000*

Scuola estiva su "Methods in computer simulation"

Manchester, Regno Unito.

*7-17 Settembre 1999*

Scuola Istituto Nazionale di Fisica della Materia (INFN) su "Teoria della materia condensata"

*7-17 Luglio 1998*

Scuola NATO-ASI su "New approaches to problems in liquid state theory"

Patti Marina, Italia.

## **INTERESSI DI RICERCA**

In generale, i miei interessi si focalizzano sulla teoria e simulazione al computer di sistemi della materia condensata e soffice nello stato fluido. Tali sistemi includono un ampio spettro di materiali con un certo numero di applicazioni nel campo della bio-tecnologia, ingegneria delle superfici, medicina, e risorse energetiche rinnovabili quali, ad esempio, miscele polimeriche, sistemi colloidali, soluzioni di proteine, e fluidi confinati all'interno di strutture porose o di strutture geometriche semplici.

## **SERVIZI ALLA COMUNITA' ACCADEMICA**

Oltre alla descrizione sintetica sotto riportata, svolgo regolare attivita' di revisore di applicazioni di studenti per borse di studio a livello di Masters/Dottorato e di progetti di ricerca, su richiesta della Fondazione di Ricerca Nazionale (NRF) del Sud Africa. Ho anche revisionato progetti di ricerca sottomessi alla Societa' di Chimica Americana (ACS, Stati Uniti) e fatto parte di diverse commissioni per valutare l'idoneita' di candidati per posizioni accademiche all'interno della mia attuale universita' in Sud Africa (University of Kwazulu-Natal). Dal 2013 sono membro della commissione "Ricerca e lauree di grado superiore (Masters, Dottorato)" nella School of Chemistry and Physics, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

2016

Membro della commissione per la valutazione dei premi assegnati al Workshop annuale dei borsisti dell'Istituto Nazionale di Fisica Teorica del Sud Africa (NITheP).

Membro della commissione per la valutazione dei rinnovi delle posizioni sudafricane di Research Chair (SARCHI chair) della Fondazione di Ricerca Nazionale (NRF) del Sud Africa.

Esaminatore esterno della tesi di dottorato "Bulk heterojunction organic cell and thin film electrode buffer layers: synthesis, preparation and characterization" di Alhadi A. A. Arbab, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

2015

Line Manager reggente, raggruppamento di Fisica del campus di Pietermaritzburg, School of Chemistry and Physics, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

Rappresentante del raggruppamento di Fisica della University of Kwazulu-Natal nella conferenza di pianificazione strategica nazionale per implementare le raccomandazioni del comitato di revisione dell'insegnamento della Fisica a livello universitario (Sud Africa).

Esaminatore esterno della tesi di Masters "Single and Double Layer Heterojunction Organic Solar Cell" di M. H. Hlongwane, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

Esaminatore esterno della tesi di Masters "One-dimensional fluid model with oscillating, exponentially decaying pair interactions" di G. M. Maziya, University of Stellenbosch, Sud Africa.

2014

Membro della commissione per la assegnazione delle borse di studio di Dottorato di ricerca, settore di Scienze Fisiche, della Fondazione di Ricerca Nazionale (NRF) del Sud Africa.

Esaminatore esterno della tesi di Masters "Generation and detection of Bessel beams" di Thandeka Mhlanga, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

Esaminatore esterno della tesi di Masters "Bulk heterojunction organic solar cell" by Wiseman Mpilo Dlamini, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

2013

Membro della commissione per la valutazione dei progetti di ricerca del settore di Scienze Fisiche nell'ambito del programma competitiva per ricercatori con rating (CPRR) della Fondazione di Ricerca Nazionale (NRF) del Sud Africa.

Membro della commissione per la assegnazione delle borse di studio di Dottorato di ricerca, settore di Scienze Fisiche, della Fondazione di Ricerca Nazionale (NRF) del Sud Africa.

Esaminatore esterno della tesi di Masters "Quantum dynamics in classical-temperature baths" di Nkosinathi Dlamini, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

2012

Esaminatore esterno della tesi di Masters "Monitoring the States of Single Quantum Systems" by Kevin Garapo, University of Kwazulu-Natal, Sud Africa.

**ATTIVITA' DI REVISORE (REFEREE) PER RIVISTE SCIENTIFICHE INTERNAZIONALI**

Journal of Smart and Nano Materials (Taylor & Francis)

Journal of Physical Chemistry C (American Chemical Society)

Chemical Physics Letters (Elsevier)

Journal of the Royal Society Interface (Royal Society Publishing)

Journal of Physics A (Institute of Physics)

Physica Scripta (Elsevier)

Molecular Physics (Taylor & Francis)

Physical Review Letters (American Physical Society)

Soft Matter (Royal Society of Chemistry)

Physical Chemistry Chemical Physics (Royal Society of Chemistry)

Journal of Physical Chemistry B (American Chemical Society)

Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics)

Physical Review E (American Physical Society)

Journal of Physics: Condensed Matter (Institute of Physics)

European Journal of Physics (Institute of Physics)

New Journal of Chemistry (Royal Society of Chemistry)

Crystal Growth and Design (American Chemical Society)

Thermochimica Acta (Elsevier)

**IDONEITA'/PREMI - BORSE DI STUDIO DA CONCORSI PER TITOLI ED ESAMI (PERIODI ANTECEDENTE POSIZIONE PERMANENTE)**

Luglio 2008 – Marzo 2010

Assegno di ricerca universitario presso il Dipartimento di Fisica, Università degli studi di Messina (Italia)

2009

Borsa di studio nell'ambito del network europeo HPC-Europa (High Performance Computing – Europa;  
<http://www.hpc-europa.eu/>)

2008

Borsa di studio nell'ambito del network europeo HPC-Europa (High Performance Computing – Europa;  
<http://www.hpc-europa.eu/>)

2007

Borsa di studio nell'ambito del network europeo HPC-Europa (High Performance Computing – Europa;  
<http://www.hpc-europa.eu/>)

Idoneità a ricercatore di terzo livello presso l'Istituto di Biofisica del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR).

*Luglio 2004 – Giugno 2008*

Assegno di ricerca universitario presso il Dipartimento di Fisica, Università degli studi di Messina (Italia).

2005

Culture della materia nel settore scientifico-disciplinare FIS03, Facoltà di Scienze, Università degli studi di Messina (Italia).

2004

Premio per Giovani Ricercatori per eccellenza nella ricerca del settore scientifico-tecnologico, Università degli studi di Messina (Italia).

Fondi di ricerca per Giovani ricercatori per il progetto “Teoria e Simulazione al Computer di fluidi bull e non-omogenei” presso Università degli studi di Messina (Italia).

*Febbraio 2002 – Gennaio 2004*

Borsa di studio post-dottorato, Università degli studi di Messina (Italia).

2002

Borsa di studio di un anno del CNR presso istituzioni scientifiche estere (School of Chemical Engineering and Materials Science, University of Oklahoma (USA).)

Borsa di studio “Angelo della Riccia” per attività di ricerca in paesi stranieri (School of Chemical Engineering and Materials Science, University of Oklahoma (USA).)

2001

Borsa di studio Istituto Nazionale di Fisica della Materia (INFM) presso Università degli studi di Messina (Italia).

*1998-2000*

Borsa di studio di Dottorato di Ricerca presso Università degli studi di Messina (Italia).

## **PERIODI DI RICERCA DI BREVE DURATA FUORI SEDE**

*Dicembre 2016 – Gennaio 2017*

“Visiting Researcher” presso il Dipartimento di Science Matematiche ed Informatiche, Scienze Fisiche e Science della Terra, Università degli studi di Messina (Italia).  
Contatto: Prof C. Caccamo

*Luglio-Agosto 2010*

“Visiting Scientist” presso il Department of Chemical & Materials Engineering, California Polytechnic University, Pomona, Stati Uniti.  
Contatto: Prof Lloyd L. Lee

*Settembre-Novembre 2009*

HPC-Europa (<http://www.hpc-europa.eu/>) visitor presso il Centre of Materials and Processes School of Engineering and Electronics, University of Edinburgh (UK).  
Contatto: Dr Lev Sarkisov

*Gennaio-Marzo 2008*

HPC-Europa (<http://www.hpc-europa.eu/>) visitor presso il Centre of Materials and Processes School of Engineering and Electronics, University of Edinburgh (UK).  
Contatto: Dr Lev Sarkisov

*Ottobre-Dicembre 2007*

HPC-Europa (<http://www.hpc-europa.eu/>) visitor presso il Centre of Materials and Processes School of Engineering and Electronics, University of Edinburgh (UK).  
Contatto: Dr Lev Sarkisov

*Giugno 2007*

“Visiting Scientist” presso il Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität, Düsseldorf (GE).  
Contatto: Prof Hartmut Löwen.

*Maggio 2007*

Visiting Scientist presso il Centre of Materials and Processes, School of Engineering and Electronics, University of Edinburgh (UK).  
Contatto: Dr Lev Sarkisov.

*Giugno-Agosto 2001*

Visiting Scientist presso la School of Chemical Engineering and Materials Science, University of Oklahoma (USA).

Contatto: Prof Lloyd L. Lee.

*Aprile 2001*

Dipartimento di Fisica, Università degli studi di Modena e Reggio-Emilia (Italia)  
Contatto: Prof Mauro Ferrario.

*Gennaio-Febbraio 2000*

Laboratorio di Bio-Spettroscopia, Università degli studi di Milano (Italia).  
Contatto: Prof Giuseppe Chirico

### **ATTIVITA' DI INSEGNAMENTO**

*Luglio-Ottobre 2017*

Fisica Statistica (PHYS362)  
College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2017*

Metodi Matematici (PHYS752)  
College of Agriculture, Engineering and Science, University of Kwazulu-Natal (UKZN, Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2017*

Fisica Statistica avanzata (PHYS741)  
College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2016*

Metodi Matematici (PHYS752)  
College of Agriculture, Engineering and Science, University of Kwazulu-Natal (UKZN, Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2016*

Fisica Moderna per le Scienze della Vita ed Agrarie (PHYS133)  
Supervisore delle attività di Laboratorio, College of Agriculture, Engineering and Science,  
UKZN (South Africa).

*Luglio-Ottobre 2016*

Fisica Statistica (PHYS362)  
College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2016 February-May 2016*

Fisica Statistica avanzata (PHYS741)  
College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2015 February-March 2015*

Introduzione alla Fisica per le Scienze della Vita ed Agrarie (PHYS131)  
Supervisore delle attività di Laboratorio, College of Agriculture, Engineering and Science,  
UKZN (South Africa).



*Febbraio-Maggio 2015*

Fisica Statistica avanzata (PHYS741)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2014*

Termodinamica (PHYS212)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (South Africa).

*Settembre-Ottobre 2014*

Metodi Matematici (PHYS752)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Luglio-Ottobre 2014*

Fisica Statistica (PHYS362)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2014*

Introduzione alla Fisica per le Scienze della Vita ed Agrarie (PHYS131)

Supervisore delle attività di Laboratorio, College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2014*

Fisica Statistica avanzata (PHYS742)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2013*

Termodinamica (PHYS212)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2013*

Metodi Matematici (PHYS752)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Luglio-Ottobre 2013*

Fisica Moderna per le Scienze della Vita ed Agrarie (PHYS133)

Supervisore delle attività di Laboratorio, College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Luglio-Ottobre 2013*

Fisica Statistica (PHYS362)

Lecturer, College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2013*

Introduzione alla Fisica per le Scienze della Vita ed Agrarie (PHYS131)

Supervisore delle attività di Laboratorio, College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2013*

Fisica Statistica e Superfluidità (PHYS742)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2012*

Termodinamica (PHYS212)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2012*

Metodi Matematici (PHYS752)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Luglio-Ottobre 2012*

Fisica Statistica (PHYS362)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2012*

Fisica Statistica e Superfluidita' (PHYS742)

College of Agriculture, Engineering and Science, UKZN (Sud Africa).

*Settembre-Ottobre 2011*

Metodi Matematici (PHYS752)

Faculty of Science and Agriculture, UKZN (Sud Africa).

*Luglio-Ottobre 2011*

Fisica Statistica e Superfluidita' (PHYS742)

Faculty of Science and Agriculture, UKZN (Sud Africa).

*Aprile-Maggio 2011*

Termodinamica (PHYS131)

Faculty of Science and Agriculture, UKZN (Sud Africa).

*Febbraio-Maggio 2011*

Fisica Statistica e Termodinamica (PHYS306)

Faculty of Science and Agriculture, UKZN (Sud Africa).

*Aprile-Maggio 2009*

Fisica avanzata della materia condensata per studenti del terzo anno del corso di laurea di primo livello in Fisica.

Facolta' di Scienze, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*Aprile-Maggio 2009*

Fisica statistica avanzata per studenti del terzo anno del corso di laurea di primo livello in Fisica.

Facolta' di Scienze, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*Marzo-Giugno 2009*

Informatica per studenti del primo anno del corso di laurea di primo livello in Chimica e Tecnologia Farmaceutica – Farmacia

Facolta' di Farmacia, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*March-June 2008*

Informatica per studenti del primo anno del corso di laurea di primo livello in Chimica e Tecnologia Farmaceutica – Farmacia

Facolta' di Farmacia, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*Settembre-Ottobre 2007*

Meccanica Analitica per student del secondo anno del corso di laurea di primo livello in Fisica  
Facolta' di Scienze, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*January-February 2007*

Fisica statistica avanzata per studenti del terzo anno del corso di laurea di primo livello in Fisica.  
Facolta' di Scienze, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*March-June 2007*

Informatica per studenti del primo anno del corso di laurea di primo livello in Chimica e Tecnologia  
Farmaceutica  
Facolta' di Farmacia, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*June-July 2006*

Informatica per studenti del primo anno del corso di laurea di primo livello in Fisica.  
Facolta' di Scienze, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*March-May 2006*

Informatica per studenti del primo anno del corso di laurea di primo livello in Infermieristica  
Facolta' di Medicina, Universita' degli studi di Messina (Italia).

*June-July 2005*

Fisica statistica avanzata per studenti del terzo anno del corso di laurea di primo livello in Fisica.  
Facolta' di Scienze, Universita' degli studi di Messina (Italia).

## **RELATORE DI TESI DI LAUREA/DOTTORATO**

2017 – attuale Sig.re Tapiwa Musunga, Masters in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2016 – attuale Sig.re Sandile T. Mamba, Dottorato di Ricerca in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2016 – attuale Sig.re Anele Mkanya, Dottorato di Ricerca in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2015 – attuale Sig.re Francis M. Gaitho, Dottorato di Ricerca in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2016

Sig.re Jashan Naicker, Tesi di Honours in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2012-2015

Sig.ra Mireille Megnidio-Tchoukouegno, Dottorato di Ricerca in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2014-2015

Sig.re Anele Mkanya, Masters in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2013-2015

Sig.re Berhanu Aragie Woldetsadik, Dottorato di Ricerca in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2015

Sig.re Verlan Moodley, Tesi di Honours in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2013-2014

Sig.re Owen Daniel Pandaram, Masters in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2014

Sig.re Mdusumeni Isaac Nxumalo, Tesi di Honours in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2012

Dr Miguel Cavero, borsista post-dottorato in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2011

Sig.re Lizwe Wandile Mdakane, Tesi di Honours in Fisica (UKZN, Sud Africa).

2010-2011

Sig.re Bruno Russo, Masters in Fisica (Universita' degli studi di Messina (Italia).  
– correlatore con il Prof P V Giaquinta).

## SEMINARI SU INVITO

*30 Novembre 2017*

“Computational studies of complex fluids”

Department of Chemistry, University of Mauritius, Port Luis, Mauritius.

*10 Febbraio 2015*

“Physics of polymer blends: a microscopic approach”

Department of Physics, University of Indonesia, Jakarta, Indonesia.

*28 Settembre 2011*

“Effective interactions in atomistic studies of lysozyme solutions”

NITheP, Stellenbosch, South Africa.

*06 Settembre 2010*

“A computational insight of protein interactions”

School of Physics, Trinity College, Dublin, Ireland.

*29 Luglio 2010*

“Critical behaviour of binary fluid mixtures in random pores”

Department of Chemical & Materials Engineering, California State Polytechnic University, Pomona, USA.

*8 Luglio 2010*

“A computational approach to the study of globular protein solutions”

Department of Chemical & Materials Engineering, California State Polytechnic University, Pomona, USA.

*16 Dicembre 2008*

“Coarse graining of complex fluids: two case-studies”

Institute of Theoretical Physics, University of Göttingen, Germany.

24 Ottobre 2008

“Modeling of globular protein solutions: the computational challenge”  
School of Physics, University of Kwazulu-Natal, Durban, South Africa.

21 Ottobre 2008

“Modeling of globular protein solutions: the computational challenge”  
School of Physics, University of Kwazulu-Natal, Pietermaritzburg, South Africa.

13 Giugno 2007

“Colloidal models and phase transitions of complex fluids”  
Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität, Düsseldorf, Germany.

24 Maggio 2007

“Simple modeling of complex fluids: what amount of information can we get from?”  
Institute for Materials and Processes, University of Edinburgh, United Kingdom.

## **RELAZIONI ORALI PRESSO CONFERENZE INTERNAZIONALI**

11<sup>th</sup>-14<sup>th</sup> December 2017

“Polymer topology in surface absorption of binary blends” – Invited Talk (e Chairman di sessione parallela)  
*African Materials Research Society (AMRS) 2017 conference, Gaborone, Botswana.*

03<sup>rd</sup> – 04<sup>th</sup> September 2017

“Exploiting polymer topology for surface modification of thermoplastics”  
*European Conference on Thermophysical Properties, ECTP 2017, Graz, Austria.*

18<sup>th</sup> – 23<sup>rd</sup> June 2017

“Exploiting polymer topology for surface modification of thermoplastics” (anche Chairman di sessione parallela)  
*ICMAT 2017, 9<sup>th</sup> International conference on Materials for Advanced Technologies, Singapore.*

13 Marzo – 17 Marzo 2017

“Unravelling the surface composition of topologically-different polymer blends” – Invited Talk  
*EMN Meeting on Polymer 2017, Auckland, New Zealand.*

26 Febbraio – 1 Marzo 2017

“Understanding the role of polymer topology in surface absorption” – Keynote Lecture (Invited Talk)  
*40<sup>th</sup> Annual Meeting of The Adhesion Society, St. Petersburg, Florida, USA.*

5 – 9 Dicembre 2016

“Computational studies of binary polymer blends”  
*CHPC National Meeting 2016, East London, South Africa.*

2 – 6 Ottobre 2016

“Interfacial properties of linear-cyclic polymer blends”  
*The 11<sup>th</sup> Asian Thermophysical Properties Conference, Yokohama, Japan.*

18-22 Luglio 2016

"Interfacial properties of linear-cyclic polymer blends"  
ICPAC 2016 "Emerging Trends in Chemical Sciences", Mauritius.

28 Settembre-2 Ottobre 2015

"Anomalous adsorption of linear-cyclic polymer blends" (Invited Talk)  
FISMAT 2015, University of Palermo, Palermo (Italy).

21-26 Giugno 2015

"Interfacial properties of linear-cyclic polymer blends"  
Nineteenth Symposium on thermophysical properties, Boulder, Colorado (USA)

31 Agosto-04 Settembre 2014

"Interfacial Properties and Dynamics of linear-cyclic polymer blends"  
ECTP 2014 – European Conference on Thermophysical Properties, Porto (Portugal)

24-29 Giugno 2012

"Effective interactions in atomistic studies of lysozyme solutions"  
18th Symposium on thermo-physical properties, Boulder, Colorado (USA)

15-17 Giugno 2010

"Effective interactions in globular protein solutions"  
Translational Access Meeting 2010, Helsinki, Finland.

15-18 Luglio 2009

"Effective protein interactions underlying crystal contacts in aqueous solutions"  
"New Trends in Simulating Colloids: from Models to Applications" workshop,  
CECAM, Lausanne, Switzerland.

15-17 Dicembre 2008

"A numerical assessment of solvated protein interactions underlying hydrophobic patches"  
Translational Access Meeting 2008, Stuttgart, Germany.

22-26 Novembre 2008

"Nonequilibrium MD as a probe of protein interactions in aqueous solutions"  
Final Arrested Matter Conference, Taormina, Italy (<http://www.arrestedmatter.net/>).

16-19 Giugno 2008

"Molecular dynamics characterization of protein-protein crystal contacts in aqueous solutions"  
Poyelectrolytes 2008, Coimbra, Portugal.

5-7 Luglio 2007

"Phase diagram of binary, athermal mixtures: theoretical and simulation results"  
"Fluid phase behaviour and critical phenomena from liquid state theories and Simulation" workshop, CECAM, Lyon, France.

20-24 Gennaio 2007

"Phase diagram of binary, athermal mixtures: theoretical and simulation results"  
"Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids" workshop, Bad Gastein, Austria.

29-31 Agosto 2006

“Structure and Phase Equilibria of Fluid Mixtures in random pores: simulation and theoretical results”  
“Computational aspects of building blocks, nucleation, and synthesis of porous materials” workshop,  
CECAM, Lyon, France.

2-4 Dicembre 2005

“Thermodynamic stability of fluid-fluid phase separation in binary, athermal mixtures: the role of nonadditivity”  
CRS-SOFT meeting, L’Aquila, Italy.

22-25 Giugno 2005

“Stripe phases in systems with core-corona molecular architecture”  
“Materials, Matter and Devices (MMD) meeting”, Genova, Italy.

8-12 Maggio 2005

“Stripe phases from isotropic repulsive interactions”  
“NANOTECH 2005” conference, Anaheim, California USA.

6-8 Aprile 2005

“Stripe phases in systems with core-corona molecular architecture”  
“Thermodynamics 2005” conference, Sesimbra, Portugal.

12-15 Luglio 2004

“Theoretical phase diagram determination of globular protein solutions” (Invited Talk)  
“Disorder, Complexity and Biology” STATPHYS 22 satellite conference,  
Varanasi (India).

8-10 Giugno 2004

“Microscopic Determination of the Phase Diagrams of Lysozyme and gamma-Crystallin Solutions”  
“INFM meeting” (conference of the National Institute of Condensed Matter Physics), Genova, Italy.

20-26 Luglio 2003

“Liquid-liquid phase equilibria of gas mixtures in nanoporous media and effects of confinement”  
Tenth Annual International Conference on Composites/Nano Engineering ICCE-10, New Orleans (USA).

17-19 Febbraio 2003

“Simulation and theoretical study of athermal mixtures in random matrices”  
“PanAmerican Workshop on Molecular and Materials Sciences; Theoretical and Computational Aspects”, Cuernavaca, Mexico.

## **PROGETTI DI RICERCA FINANZIATI**

2017-2019 NRF Competitive grant per Ricercatori con rating “Computational and Experimental Study of Structure-Property Relationships in Organic Solar Cell Materials” (Principal Investigator. Budget: R 515000).

2015-2017 NRF Blue Skies grant “Microscopic theoretical study of bulk and inhomogeneous Colloidal Structures” (Principal Investigator. Budget: R 260000).

2015-2017 NRF Competitive grant per Ricercatori con rating “Investigation of bulk Heterojunction organic solar cell” (Co-investigator. Budget: R 455000).

2016 Fondi KIC per mobilita' fra strutture di ricerca (R 40.000).

2014-2016 NRF Competitive grant per Ricercatori con rating "Multiscale theoretical and experimental modelling of electrochemical energy storage and conversion" (Principal Investigator. Budget: R 864000)

2014 NRF Blue Skies Concept Notes "Microscopic Theoretical Study of DNA-Grafted Colloidal Structures" (Principal Investigator. Budget: R194500).

2012-2017 Fondi di incentivazione NRF (Principal Investigator. Budget: R240.000).

2013 Fondi Knowledge, Interchange, Collaboration (KIC) dell' NRF per mobilita' fra strutture di ricerca (R 20.000)

2012 Fondi strategici della School of Chemistry and Physics (UKZN) (R100.000).

2012 Fondi per miglioramento dell' efficienza ed infrastruttura DoHET (R65.000).

2011 Grant per sviluppo di attivita' di ricerca della Faculty of Science and Agriculture, UKZN (R55.000).

2011 Grant per ricerca competitiva UKZN (R20.000).

#### **PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI:**

1. C. Caccamo and G. Pellicane  
"RY theory investigation of phase separation in binary hard sphere mixtures"  
*Physica A* **235**, 149 (1997).
2. C. Caccamo, G. Pellicane and E. Enciso  
"PY bridge functions in a thermodynamic self-consistent theory of hard sphere mixtures"  
*Physical Review E* **56**, 6954 (1997).
3. C. Caccamo, D. Costa and G. Pellicane  
"A comprehensive study of the phase diagram of symmetric hard core Yukawa mixtures"  
*Journal of Chemical Physics* **109**, 4498 (1998).
4. C. Caccamo, D. Costa and G. Pellicane  
"Theoretical and simulation study of model protein solutions"  
NATO ASI School proceedings on "New Approaches to Old and New Problems in Liquid State Theory - Inhomogeneities and Phase Separation in Simple, Complex and Quantum fluids"  
Vol. **529**, 421 (1999).
5. M. Björling, G. Pellicane and C. Caccamo  
"On the Flory-Huggins and integral equation theory application to hard sphere mixtures"  
*Journal of Chemical Physics* **111**, 6884 (1999).
6. C. Caccamo, G. Pellicane, D. Costa, D. Pini and G. Stell  
"Thermodynamically self-consistent theories of fluids interacting through short-range forces"



*Physical Review E* **60**, 5533 (1999).

7. C. Caccamo, G. Pellicane and R. Ricciari  
"Generalized Mean Spherical Approximation with internal thermodynamic consistency constraints: an application to hard sphere mixtures"  
*Nuclear and Condensed Matter Physics*, Vol. **513**, 55 (2000).
8. C. Caccamo, G. Pellicane, R. Ricciari and G. Faggio  
"Generalized Mean Spherical description of highly asymmetric hard sphere mixtures"  
*Journal of Physics: Condensed Matter* **12**, 2613 (2000).
9. C. Caccamo, D. Costa and G. Pellicane  
"Theoretical investigations of simple model protein solutions"  
*Nuclear and Condensed Matter Physics*, Vol. **513**, 51 (2000).
10. C. Caccamo, G. Pellicane and D. Costa  
"Phase transitions in hard-core Yukawa fluids: toward a theory of phase stability in protein solutions"  
*Journal of Physics: Condensed Matter* **12**, A437 (2000).
11. G. Malescio and G. Pellicane  
"Simple fluids with complex phase behavior"  
*Physical Review E* **63**, 020501 (R) (2001).
12. M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa and G. Pellicane  
"Phase diagram of model  $C_{n>70}$  fullerenes"  
*Europhysics Letters* **54**, 468 (2001).
13. G. Malescio, G. Franzese, G. Pellicane, A. Skibinsky, S.V. Buldyrev and H.E. Stanley  
"Liquid-liquid transition in one-component systems"  
*Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 2193 (2002).
14. C. Caccamo and G. Pellicane  
"Microscopic theories of model macromolecular fluids and fullerenes: the role of thermodynamic consistency"  
*Journal of Chemical Physics* **117**, 5072 (2002).
15. G. Malescio and G. Pellicane  
"Stripe phases from isotropic repulsive interactions"  
*Nature Materials* **2**, 97 February 2003.
16. G. Pellicane, D. Costa and C. Caccamo  
"Phase coexistence in a DLVO model of globular protein solutions"  
*Journal of Physics: Condensed Matter* **15**, 375 (2003).
17. D. Costa, G. Pellicane, M.C. Abramo and C. Caccamo  
"Free energy determination of phase coexistence in model C60: A comprehensive Monte Carlo study"  
*Journal of Chemical Physics* **118**, 304 (2003).
18. D. Costa, G. Pellicane, C. Caccamo, M. Pashinger, G. Kahl  
"Theoretical description of phase coexistence in model C60"

*Physical Review E* **68**, 021104 (2003).

19. G. Pellicane, D. Costa and C. Caccamo  
“Cloud and solubility temperatures versus ionic strength in model lysozyme solutions”  
*Journal of Physics: Condensed Matter* **15**, S3485 (2003).
20. M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, G. Pellicane and R. Ruberto  
“Atomistic vs two-body central potential models of C60: A comparative molecular dynamics study”  
*Physical Review E* **69**, 031112 (2004).
21. G. Pellicane, C. Caccamo, D. S. Wilson and L. L. Lee  
“A replica Ornstein-Zernike self consistent theory of mixtures in random pores”  
*Physical Review E* **69**, 061202 (2004).
22. B. Pellicane, G. Pellicane and G. Malescio  
“Polymorphism in simple liquids: a Gibbs Ensemble Monte Carlo study”  
*Journal of Chemical Physics* **120**, 8671 (2004).
23. G. Malescio and G. Pellicane  
“Stripe patterns in two-dimensional systems with core-corona molecular architecture”  
*Physical Review E* **70**, 021202 (2004).
24. G. Pellicane, D. Costa and C. Caccamo  
“Microscopic determination of the phase diagrams of lysozyme and  $\beta$ -crystallin solutions”  
*Journal of Physical Chemistry B* **108**, 7538 (2004).
25. G. Pellicane, D. Costa and C. Caccamo  
“Theory and simulation of phase coexistence in short-range models of globular protein solutions”  
*Journal of Physics: Condensed Matter* **16**, S4923 (2004).
26. G. Pellicane, F. Saija, C. Caccamo and P.V. Giaquinta  
“Thermodynamic stability of fluid-fluid phase separation in binary athermal mixtures:  
The Role of Nonadditivity”  
*Journal of Physical Chemistry B* **110**, 4539 (2006).
27. G. Pellicane and L.L. Lee  
“Phase separation of model adsorbates in random matrices”  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **9**, 1064 (2007).
28. G. Pellicane, F. Saija, C. Caccamo and P.V. Giaquinta  
“Virial coefficients and demixing of athermal nonadditive mixtures”  
*Journal of Physical Chemistry B* **111**, 4503 (2007).
29. G. Pellicane, R. L. C. Vink, C. Caccamo and H. Löwen  
“Colloid-polymer mixtures in the presence of quenched disorder: a theoretical and computer simulation study”  
*Journal of Physics: Condensed Matter* **20**, 115101 (2008).

30. P.G. De Sanctis-Lucentini and G. Pellicane  
 "Critical behavior of symmetrical fluid mixtures in random pores"  
*Physical Review Letters* **101**, 246101 (2008).
31. G. Pellicane, G. Smith and L. Sarkisov  
 "Molecular dynamics characterization of protein crystal contacts in aqueous solutions"  
*Physical Review Letters* **101**, 248102 (2008).
32. M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, G. Pellicane and R. Ruberto  
 "Molecular Dynamics of an Embedded Charge Model of Lysozyme Aqueous Solutions"  
*Journal of Physical Chemistry B* **114**, 9109 (2010).
33. L.L. Lee, G. Pellicane and W. Chapman  
 "A star-function based density functional theory using the local density approach"  
*Journal of Supercritical Fluids* **55**, 524 (2010).
34. M.C. Abramo, C. Caccamo, M. Calvo, V. Conti Nibali, D. Costa, R. Giordano, G. Pellicane, R. Ruberto and U. Wanderlingh  
 "Molecular dynamics and small-angle neutron scattering of lysozyme aqueous solutions"  
*Philosophical Magazine* **91**, 2066 (2011).
35. L.L. Lee and G. Pellicane  
 "A potential distribution induced mapping of free energies and their wetting behaviour for simple fluids"  
*Condensed Matter Physics* **14**, 33601 (2011).
36. L.L. Lee and G. Pellicane  
 "A potential distribution induced mapping of free energies for simple fluids"  
*Physica A* **391**, 1942 (2012).
37. M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, G. Pellicane, R. Ruberto and U. Wanderlingh  
 "Effective interactions in lysozyme aqueous solutions: a small-angle neutron scattering and computer simulation study"  
*Journal of Chemical Physics* **136**, 035103 (2012).
38. G. Pellicane  
 "A colloidal model of lysozyme aqueous solutions: a computer simulation and theoretical study"  
*Journal of Physical Chemistry B* **116**, 2114 (2012).
39. M.C. Abramo, C. Caccamo, M. Cavero, D. Costa, G. Pellicane, R. Ruberto and U. Wanderlingh  
 "Effective protein-protein interaction from structure factor data of a lysozyme solution"  
*Journal of Chemical Physics* **139**, 054904 (2013).
40. G. Pellicane and M. Cavero  
 "Theoretical study of interactions of BSA protein in a NaCl aqueous solution"  
*Journal of Chemical Physics* **138**, 115103 (2013).
41. G. Pellicane, R.L.C. Vink, B. Russo and P.V. Giaquinta  
 "Fluids in porous media: The case of neutral walls"  
*Physical Review E* **88**, 042131 (2013).

"Theory and computer simulation of hard-core Yukawa mixtures: thermodynamical, structural and phase coexistence properties"  
*Journal of Physics: Condensed Matter*, **29**, 365102 (2017).

55. S. Prestipino, G. Munao', D. Costa, G. Pellicane, and C. Caccamo  
"Two-dimensional mixture of amphiphilic dimers and spheres: Self-assembly behaviour"  
*Journal of Chemical Physics*, **147**, 144902 (2017).

56. G. Fiumara, F. Saija, G. Pellicane, M. Lopez de Haro, A. Santos, and Santos B. Yuste  
"Virial coefficients, equation of state, and demixing of binary asymmetric nonadditive hard-disk mixtures"  
*Journal of Chemical Physics*, **147**, 164502 (2017).

### RAPPORTI DI RICERCA SU VOLUMI INTERNAZIONALI

- 1 G. Pellicane, G. Smith and L. Sarkisov  
"Molecular dynamics studies of protein-protein interactions: linking atomistic and mesoscales"  
*Science and Supercomputing in Europe*, edito da HPC-Europa, Pan-European Infrastructure on High Performance Computing, ISBN 978-88-86037-22-8 (2008).
- 2 G. Pellicane, G. Smith and L. Sarkisov  
"Molecular dynamics studies of protein-protein interactions: linking atomistic and mesoscales"  
*Science and Supercomputing in Europe*, edito da HPC-Europa, Pan-European Infrastructure on High Performance Computing, ISBN 978-88-86037-22-8 (2009).
- 3 G. Pellicane and L. Sarkisov  
"Towards a new generation of efficient polyelectrolyte membranes: computer simulation of composite silica/naflon materials"  
*Science and Supercomputing in Europe*, edito da CINECA, ISBN 978-88-86037-23-5 (2010).