

Curriculum vitae

DECRETO RETTORE D.R. n. 1919/2023 del 19.07.2023

CODICE CONCORSO 2023POR021

INFORMAZIONI PERSONALI Enrico Bodo

📍 Dipartimento di Chimica, Università di Roma "La Sapienza", Piazzale A. Moro 5,
00185 Rome, Italy

✉ enrico.bodo@uniroma1.it

🌐 <https://sites.google.com/uniroma1.it/enricobodo/home>

🌐 <https://www.webofscience.com/wos/author/rid/F-4375-2012>

🆔 [ORCID 0000-0001-8449-4711](https://orcid.org/0000-0001-8449-4711)

Nazionalità Italiana

LINGUE

Madrelingua Italiano
Altre lingue English (proficient)

DIGITAL SKILLS

Operating systems Unix/Linux (avanzato), MacOSX, Windows
Programmazione Fortran (avanzato), Bash scripting

PARTE II: EDUCAZIONE

2002 Aprile—2003 Dicembre Assegnista di ricerca in chimica teorica sotto la supervisione del Prof. F.A. Gianturco presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma La Sapienza, Titolo: [Dynamical studies of the energetic processes in molecular gases at ultra-low temperatures](#)

1999—2001 Dottorato in Scienze Chimiche, presso l'Università di Roma La Sapienza. Titolo della tesi: [The Lithium chemistry in the early Universe: quantum treatment of interactions and dynamics](#). Relatore: Prof. F.A. Gianturco.

21-maggio-1998 Laurea (magna cum laude) in chimica presso l'Università di Roma La Sapienza.

PARTE III: POSIZIONI ACCADEMICHE

2015—oggi Professore Associato in Chimica Fisica (03/A2) presso il Dipartimento di Chimica dell'università di Roma La Sapienza.

2004—2015 Ricercatore e Docente presso il Dipartimento di Chimica dell'università di Roma La Sapienza.

Abilitazioni

2023 Abilitazione (ASN) per professore di I fascia in Chimica Fisica (settore 03/A2).
2016 Abilitazione (ASN) per professore di I fascia in Chimica Fisica (settore 03/A2).
2013 Abilitazione (ASN) per professore di II fascia in Chimica Inorganica (settore 03/B1).
2013 Abilitazione (ASN) per professore di II fascia in Chimica Fisica (settore 03/A2).

Professore Invitato

2017 Novembre Professore invitato presso l'Università di [Paris Saclay](#), presso Institut de Chimie Physique, Orsay, Francia

2015 Giugno Professore invitato presso l'Università di [Paris Sud](#), presso Institut de Chimie Physique, Orsay, Francia

Altre Visite

- 2013—2014 Collaboratore e visitatore per brevi periodi presso l'istituto [LAMBE](#) (Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement) CNRS, Evry, Cedex - France.
- 2004—2010 Collaboratore e visitatore per brevi periodi presso l'istituto [ITAMP](#) dell'Harvard Smithsonian Center for Astrophysics (Cambridge (MA), USA).
- 2001 [Visiting Fellow](#) dell'istituto [ITAMP](#) presso l'Harvard Smithsonian Center for Astrophysics (Cambridge (MA), USA) sotto la supervisione del Prof. A. Dalgarno.

PARTE IV: INSEGNAMENTO E ATTIVITÀ DIDATTICHE

Corsi

- AA 2021/22—2022/23 Titolare del corso per la laurea triennale in Scienze Chimiche Università degli Studi di Roma "La Sapienza": [Chimica Fisica II](#) (Chim/02, 9 crediti).
- AA 2017/18—2020/21 Titolare del corso per la laurea triennale in Chimica Università degli Studi di Roma "La Sapienza": [Chimica Fisica II](#) (Chim/02, 9 crediti).
- AA 2016/2017 Incarico di insegnamento al dottorato di Scienze Chimiche: Titolo: La teoria del funzionale densità: una guida per lo studio dei materiali complessi. (Chim/02, 3 Crediti).
- AA 2015/16—2016/17 Corso di [Chimica Fisica III](#) (Chim/02, 3 crediti)
- AA 2010/11—2022/23 Titolare del corso per la laurea magistrale in Chimica Università degli Studi di Roma "La Sapienza": [Laboratorio di meccanica quantistica e dinamica molecolare](#) (Chim/02, 9 crediti).
- AA 2006/07—2008/09 Titolare del corso per la laurea in Chimica all'Università degli Studi di Roma "La Sapienza": [Meccanica quantistica](#) (Chim/02, 5 crediti).
- AA 2006/07—2008/09 Titolare del corso per la laurea in Chimica all'Università degli Studi di Roma "La Sapienza": [Tecnologie per l'informatica chimica](#) (5 crediti)
- AA 2005/06—2009/10 Titolare del corso per la laurea in Chimica all'Università degli Studi di Roma "La Sapienza": [Applicazioni di chimica quantistica](#) (Chim/02, 4 crediti).

Attività di Terza Missione

- 21-Dic-2022 Relatore ai *Seminari di Natale* con una lezione dal titolo [Il lungo viaggio di un protone nell'universo](#), tenutosi presso il Dipartimento di Chimica de "La Sapienza". Evento ricorrente per gli studenti delle scuole superiori.
- 19-Set-2022 Relatore alla *notte dei ricercatori* con una lezione dal titolo [Gli elementi della tavola periodica](#), Dipartimento di Matematica, Università di Roma la Sapienza. Evento per gli studenti delle scuole superiori.
- 5-Mag-2022 Relatore invitato alla serie di conferenze *Spazio, ultima frontiera* organizzate da Discovery Link della facoltà di SMFN di Sapienza con una lezione sull'astrochimica presso il Dipartimento di Chimica, Università La Sapienza
- 30-Nov-2021 Oratore invitato alle *Lezioni a Palazzo* con una lezione sulla formazione degli elementi nell'universo in occasione del progetto [Tre Stazioni per Arte-Scienza](#) presso il Palazzo delle Esposizioni, Roma.
- 2019—present Membro della commissione *Ricerca e Terza Missione* del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
- 2-Dic-2019 Relatore ai *Seminari di Natale* con una lezione dal titolo [La storia degli atomi dal Big Bang ad oggi](#), tenutosi presso il Dipartimento di Chimica de "La Sapienza", Roma. Evento ricorrente per gli studenti delle scuole superiori.
- 11-Nov-2019 Relatore invitato alla *Giornata per i 150 anni della Tavola Periodica degli Elementi* con una lezione dal titolo [La storia degli atomi dal Big Bang ad oggi](#), Area della Ricerca di Roma 1, CNR, Montelibretti. Evento per gli studenti delle scuole superiori.

Tutoraggio: Relatore di tesi di dottorato

- 2022—2025 PhD XXXVIII ciclo: [Matteo Farina](#) (Prof. I. Daidone, co-supervisor)
PhD XXXVIII ciclo: [Marcello Della Sala](#) (Prof. P. D'Angelo, co-supervisor)

- 2021—2024 PhD XXXVII ciclo: [Vanessa Piacentini](#)
- 2020—2023 PhD XXXVI ciclo: [Stefano Russo](#)
- 2019—2022 PhD XXXV ciclo: [Adriano Pierini](#), Computational study of electron-transfers and singlet oxygen in aprotic metal-O₂ batteries
PhD XXXV ciclo: [Mohammed Salha](#) (Prof. G. Chass, co-supervisor), Constitution, Configuration and Conformation: Molecular engineering of tougher cement
- 2018—2021 PhD XXXIII ciclo: [Henry Adenusi](#), Proton Transfer Mechanisms in Protic Ionic Liquids
- 2017—2019 PhD XXXII ciclo: [Andrea Le Donne](#), Study of Dry Proton Mobility Inside Liquids: the Particular Case of Amino Acid-Based Ionic Liquids.

Tutoraggio: Relatore di tesi magistrali

- 2023 – [Francesca D'Ambrosio](#).
– [Aurora Capitani](#).
– [Alessandro Azzali](#), Dinamica molecolare applicata a meccanismi di rottura di meccanoformi di triarilmetano in matrici polimeriche.
- 2022 – [Simone Pistillo](#), Analisi Computazionale Sulla Possibile Formazione Di Idrossilammina In Fase Gassosa Nel Mezzo Interstellare.
– [Guido Giannetti](#), Studio teorico sulla mobilità protonica di liquidi ionici a base di acidi solfonici mediante DFT e DFTB.
– [Leonardo Biancorosso](#), Analisi teorico-computazionale multiscala del meccanismo di trasferimento di protoni in pseudo-PILs.
- 2021 – [Sara Marando](#), Spettroscopia computazionale applicata allo studio dell'ossidazione di 2,5-dichetopiperazine contenenti gruppi solfuro.
– [Gabriele Dilena](#), Studio computazionale sulla formazione di idrossilammina nel mezzo interstellare: reazioni in fase gas.
– [Vanessa Piacentini](#), Calcoli mediante Teoria del Funzionale Densità dei meccanismi di chemisorbimento di SO₂ in liquidi ionici a base di amminoacidi.
– [Matteo Farina](#), Studio mediante metodi DFT di mediatori redox coinvolti nelle batterie Li-O₂.
- 2020 – [Federica Angiolari](#), Una nuova interfaccia software per lo studio di processi reattivi nel vuoto.
– [Alice Latini](#), Studio teorico della reazione $N_2 + H_3^+ \rightarrow N_2H^+ + H_2$ nell'ambito della chimica del mezzo interstellare.
– [Stefano Onofri](#), Chemisorbimento di CO₂ in liquidi ionici biocompatibili: studio teorico dei meccanismi di reazione.
- 2019 – [Nicole Mancini](#), Ricerca, mediante calcoli teorici, degli stati di transizione nella reazione di condensazione aldolica intramolecolare asimmetrica mediata da amminoacido, per la sintesi di una nuova biciclo-carbaldeide.
– [Adriano Pierini](#), Studio computazionale della disproporzione dell'anione superossido.
– [Stefano Russo](#), Studio teorico sulla stereoselettività di reazioni aldoliche intramolecolari organo-catalizzate.
– [Martina Sebastianelli](#), Analisi computazionale di piccole molecole chirali.
- 2018 – [Giulia Bovolenta](#), Specie molecolari chirali nello spazio interstellare: la formazione del metilossirano da costituenti semplici.
– [Francesco Porcelli](#), Alla ricerca di liquidi superionici: modellizzazione della struttura e del trasferimento di protoni in liquidi ionici protici.
- 2007-2017 – [Aurora Ponzi](#), Studio teorico dello spettro di assorbimento XAS del radicale allile.
– [Luigi Tiburzi](#), Caratterizzazione Computazionale di Alchilammonio Cloruri.
– [Gabriele Lanaro](#), Cammini di reazione fotochimica per aril-solfossidi. Studio degli stati eccitati.
– [Mara Chiricotto](#), Studi teorici sulla solvatazione dei lantanoidi in DMSO.
– [Marco Pezzella](#), Studio teorico sulla fotochimica di composti nitroaromatici: fenoli e tolueni.
– [Silvana Vasile](#), Cattura di ioni idruro con composti a base di salofen-uranile: uno studio teorico
– [Veronica Macaluso](#), Studio teorico della solvatazione dei cationi lantanidi (III) in DMSO.
– [Flavio Siro Brigiano](#), Studio computazionale di sistemi estesi di liquidi ionici bio-organici.
– [Andrea Le Donne](#), Struttura e dinamica del polimero pNIPAM in liquido ionico: studio attraverso simulazioni teoriche.

Tutoraggio nella laurea triennale

2017—oggi Tutoraggio di 69 tesi triennali

PARTE V: ATTIVITÀ DI COORDINAMENTO E ORGANIZZATIVE

- 2023- Responsabile di un assegno di ricerca dal titolo “Applicazione di metodi computazionali alla previsione di proprietà chimico-fisiche di elettroliti aprotici per dispositivi di accumulo elettrochimico” nell’ambito del progetto europeo SIGNE
- 2022—oggi Membro eletto del direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana
- 2021 Membro della commissione per la valutazione dell’accesso al corso di Dottorato in Scienze Chimiche XXXVII ciclo
- 22/12/2020—14/12/2022 Membro eletto della [giunta di Facoltà di SMFN](#)
- 3/12/2020—30/10/2022 Membro eletto della [giunta di Dipartimento](#)
- 2020—2021 Responsabile di un assegno di ricerca dal titolo “Ricerca di liquidi ionici conduttivi basati su trasferimento protonico con metodi teorici”.
- 2019—oggi Membro della commissione [Ricerca e Terza Missione](#) del Dipartimento di Chimica dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza”.
- 2015—2016 Responsabile di un assegno di ricerca dal titolo “Studio teorico di liquidi ionici di seconda generazione mediante tecniche di dinamica molecolare ab initio”.
- 2013—2020 Membro della commissione [Comitato di Monitoraggio](#) della facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza”.
- 2013—2017 Membro della commissione di assicurazione della qualità preposte alla scrittura dei rapporti di riesame per la laurea magistrale in chimica dell’Università di Roma “La Sapienza”.
- 2010—oggi Membro del [collegio dei docenti del Dottorato in Scienze Chimiche](#) del Dipartimento di Chimica dell’Università degli Studi di Roma “La Sapienza”.

PARTE VI: ATTIVITÀ DI REVISIONE

- 2023 Valutatore per la "Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding (UEFISCDI)", Bucarest, Romania. Programma: *PNRR-18-2022*.
- 2022 Valutatore per il "National Science Centre Poland", Poland, Programma: *OPUS-23*, Panel ST8.
- 2021 Valutatore per la “Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding (UEFISCDI)”, Bucarest, Romania. Programma: *Postdoctoral Research Projects (PD 2021) and Research Projects for Stimulating Young Independent Teams (TE 2021)*.
- 2021—oggi Membro del Selection Panel dell’iniziativa STORIES (Storage Research Infrastructure Ecosystem) Horizon 2020.
- 2020 Valutatore per la “Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding (UEFISCDI)”, Bucarest, Romania. Programma: *Postdoctoral Research Projects (PD 2019) and Research Projects for Stimulating Young Independent Teams (TE 2019)*.
- 2018—oggi Valutatore esterno per la “German Research Foundation, Deutsche Forschungs gemeinschaft (DFG)”, Bohn, Germany.
- 2016 Valutatore per la “Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding (UEFISCDI)”, Bucarest, Romania. Programma *National Plan for Research, Development and Innovation for the period 2015 - 2020*.
- 2015 Valutatore per la linea “Computational Materials Sciences Program” dell’iniziativa dal titolo “Materials Genome Initiative”, USD department of Energy, Washington DC.
- 2012—oggi Revisore per l’ANVUR (VQR).
- 2011—oggi Revisore per l’iniziativa ISCRA (Italian Super Computing Resource Allocation at CINECA).

- 2009—oggi E.B. è referee per le seguenti riviste (elenco non esaustivo): *Angew. Chem.*, *ChemSusChem*, *J. Phys. Chem. B*, *J. Comp. Chem.*, *Chem. Phys. Lett.*, *Eur. J. Inorg. Chem.*, *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem. A*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *J. Mol. Struct.*, *Surface Science*, *ChemPhysChem*, *Int. J. of Quant. Chem.*, *Symmetry*, *ACS Omega*, *J. Comp. Chem. Organic and Biomolec. Chem.*, *Electronic Structure*, *Appl. Materials and Interfaces*, *J. Mol. Liq.*, *J. Phys. Cond. Matter.*, *Symmetry*, *Molecules*.
- 2006—oggi Membro della Società Chimica Italiana.

PARTE VII: ATTIVITÀ EDITORIALI E PREMI

- 2020 [Premio di eccellenza didattica](#) conferito dalla Facoltà di Scienze MFN per il corso di Chimica Fisica II. Il premio è basato sulle risultanze dei questionari OPIS.
- Nov. 2021—oggi *Editor in chief* di [Liquids](#).
- 2020—oggi Membro del comitato editoriale di [Molecules](#) (WOS IF 4.927, indicizzata Scopus).
- 2020—oggi Membro del comitato editoriale di [Symmetry](#) (WOS IF 2.940, indicizzata Scopus).
- 2018 [Premio di eccellenza didattica](#) conferito dalla Facoltà di Scienze MFN per il corso di Chimica Fisica II. Il premio è basato sulle risultanze dei questionari OPIS.

PARTE VIII: FINANZIAMENTI

Finanziamenti ricevuti come P.I.

- 2023 Cofinanziamento di 50000 Euro per una borsa di dottorato del 39° Ciclo dall'azienda "Cloud-Wise" per la "Progettazione e messa a punto di campi di forza Machine Learning per la caratterizzazione e lo sviluppo di elettroliti di batterie a stato solido di nuova generazione."
- 2021 Research Grant dall'Università degli Studi di Roma "La Sapienza" Exploring Proton Transfer in Biocompatible Protic Ionic Liquids with Computational Methods, 15000 Euro.
- 2018 Research Grant (con [peer-review](#)) dall'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Multidisciplinary study of intrinsic properties of model chiral molecules*, 54.000 Euro.
- 2017 Research Grant dall'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Studio multidisciplinare di proprietà intrinseche di molecole chirali modello*, 12.000 Euro.
- 2015 Research Grant (con [peer-review](#)) dall'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Characterising new generation ionic liquids by theory and experiments: the role of phosphate and bi-sulphide groups on proton transfer and conductivity*, 51.000 Euro
- 2014 Research Grant (con [peer-review](#)) dall'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Aminoacid anions in organic compounds: exploring the boundary of room temperature ionic liquids*, 40.000 Euro.
- 2011 Research Grant (con [peer-review](#)) dall'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *The structure of metal-containing compounds in protic ionic liquids: theoretical and experimental studies*, 80.000 Euro
- 2008 Research grant dalla Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza": *Elementary chemical reactions and molecular dynamics at low temperatures*, 4.000 Euro.
- 2007 Research grant dalla Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza": *Elementary chemical reactions at ultra-low temperatures*, 4.000 Euro.

Grant computazionali ricevuti come PI

- 2022-23 Progetto computazionale in ambito europeo (con [peer-review](#)) [HPC-access](#): grant Tier-0 di 6.400.000 ore di calcolo. *Polarizable Molecular Dynamics of Biocompatible Ionic Liquids*.
- 2021-22 Progetto computazionale in ambito europeo (con [peer-review](#)) [PRACE](#) (Partnership for advanced computing in Europe): grant Tier-0 di 3.200.000 ore di calcolo. *Understanding the Role of Aluminium in Cements by Ab-initio Modelling*.
- 2017 Progetto computazionale in ambito europeo (con [peer-review](#)) [PRACE](#) (Partnership for advanced computing in Europe): grant Tier-0 di 30.000.000 ore di calcolo. *Exploring Proton Transfer in Ionic Liquids*.

- 2014 Progetto computazionale in ambito europeo (con [peer-review](#)) [PRACE](#) (Partnership for advanced computing in Europe): grant Tier-0 di 27.000.000 ore di calcolo. *Amino-acid anions in organic compounds: charting the boundary of room temperature ionic liquids.*
- 2013 Progetto computazionale in ambito europeo (con [peer-review](#)) [PRACE](#) (Partnership for advanced computing in Europe): grant Tier-0 di 18.000.000 ore di calcolo. *Ab initio molecular dynamics of lanthanides in protic ionic liquids.*
- 2007-oggi Molti progetti computazionali dal CASPUR (Roma) e dal Cineca (Bologna) per un totale di circa 4.000.000 ore di calcolo su varie architetture.

Altri progetti italiani e internazionali

- 2022—oggi Partecipazione al al Centro Nazionale 4, spoke 13, progetto: *Tecnologie abilitanti per la mobilità sostenibile: accumulo elettrochimico di energia e trazione elettrica*
- 2022—oggi Partecipazione al al Partenariato Esteso 2, spoke 9, progetto: *Energy -Sustainable Advanced Materials: from theoretical design to experimental synthesis and characterization*
- 2021—oggi Partecipazione al progetto europeo [SIGNE](#), *Composite Silicon/Graphite Anodes with Ni-Rich Cathodes and Safe Ether based Electrolytes for High Capacity Li-ion Batteries* Horizon Europe Framework Programme
- 2020 Partecipazione al al progetto dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza": *Antimicrobials from facial steroidal surfactants*
- 2019 Partecipazione al al progetto dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza": *Mechanistic insights into the intein-mediated protein splicing*
- 2017 Partecipazione al progetto PRIN 2017: *Cutting-edge X-ray methods and models for the understanding of surface site reactivity in heterogeneous catalysts and sensors*
- 2016 Partecipazione al progetto dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Control and manipulation of functional properties of layered chalcogenides by molecular intercalation.*
- 2013 Partecipazione al progetto dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Theoretical models of complex nanostructured materials: ionic liquids from a coarse-grained perspective.*
- 2012 Partecipazione al progetto dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Lanthanide-containing ionic liquids: theoretical and experimental studies.*
- 2010 Partecipazione al progetto dalla Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Sulfoxides and dynamic combinatorial chemistry: experimental and theoretical studies.*
- 2009 Partecipazione al progetto dalla Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", *Solvent role in the structure and in the reactivity in dynamic systems: experiments and theory.*
- 2009 Partecipazione al progetto PRIN 2009: *Structural characterization of ionic liquids between -200 and 200 Celsius degrees temperatures*
- 2006 Partecipazione al progetto PRIN 2006: *Theoretical models and computational methods for the study of molecular processes at low and ultra-low temperature*
- 2004 Partecipazione al progetto PRIN 2004: *Theoretical models and computational methods of the quantum structures and dynamics in molecules and molecular aggregates in neutral and ionized forms*
- 2002 Partecipazione alla EU Framework V Research Networks: *Cold molecules: formation, trapping, and dynamics.* (HPRN-CT-2002-00290)
- 2002 Partecipazione alla EU Framework V Research Networks: *Electron and Positron Induced Chemistry (EPIC)* (HPRN-CT-2002-00179)

PARTE IX: ATTIVITÀ DI RICERCA

Parametri Bibliometrici

E.B. è coautore di **148** pubblicazioni, un editorial e di 5 capitoli di libri. Il suo h-index totale è **30**. Le pubblicazioni hanno collezionato **2816** citazioni in totale con una media per pubblicazione di **19** (dati Scopus 2023). L'impact factor totale è **459** e quello medio **3.12** (dati WOS).

Attività di ricerca

L'attività di ricerca di E. B. è si è svolta nel campo della chimica teorica e computazionale nel settore SSD Chim/02. Durante la sua formazione, durante il PhD e negli anni immediatamente successivi, i suoi interessi sono stati per lo più focalizzati sui processi di collisioni molecolari, il calcolo dei potenziali di interazione intermolecolari, la chimica delle basse temperature e lo studio della solvatazione molecolare in fluidi quantistici. Dall'inizio del 2009, E. B. si occupa dello studio di liquidi ionici e in particolare della loro struttura molecolare ottenuta tramite simulazioni MD e calcoli ab-initio. Negli anni più recenti (dal 2015), EB dirige il suo gruppo di ricerca che ha visto avvicinarsi molti laureandi magistrali, vari dottorandi e assegnisti di ricerca. Durante questi anni EB ha approfondito la tematica dei liquidi ionici concentrandosi su trasferimenti di protoni e altri meccanismi rilevanti per la chimica dei materiali. In tempi recenti EB si occupa anche di modellazione di reazioni redox per batterie innovative e di tecniche avanzate di dinamica molecolare per lo studio degli elettroliti. EB ha coltivato varie collaborazioni con gruppi italiani e stranieri. Tra i primi ci sono le collaborazioni con il Prof. P. Postorino (Fisica, Sapienza), con la Prof. M. Crestoni (Farmacia, Sapienza) e con S. Piccirillo (Tor Vergata); tra i secondi, le collaborazioni con il Dott. R. Spezia, ricercatore CNRS attualmente alla Sorbonne Université (Paris), con la Prof.ssa D. Scuderi dell'università Paris-Saclay, con il Prof. G. Chass presso la Queen Mary University (London)

PARTE X: ORGANIZZAZIONE E PARTECIPAZIONE A CONGRESSI

Comitati

- 2023 Comitato Scientifico del VIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale, Pisa (Settembre, 20-22).
- 2022 Conference Chair del "First Symposium for YouNg Chemists: Innovation and Sustainability (SYNC2022)", Dipartimento di Chimica, La Sapienza, Roma (Giugno, 20-23).
- 2019 Comitato organizzatore del XLVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica, La Sapienza, Roma, (Luglio 1-3).
- 2015 Comitato Organizzatore del III Convegno Divisione Chimica Teorica e Computazionale, CNR, Roma (Dicembre 14-16).
- 2008 Comitato Organizzatore del congresso: Control Of Molecular Processes Induced by Electrons and Photons: Experiments and Interpretations. A Congress in honor of Prof. Hotop, Centro interdisciplinare Beniamino Segre, Accademia Nazionale dei Lincei, Roma, (Ottobre 2-4).
- 2005 Comitato Organizzatore del congresso: EPIC-EIPAM 2005 Meeting, Joint conference for the EPIC and EIPAM EU networks, S. Martino al Cimino, Italy (Giugno 25-30).
- 2003 Comitato Organizzatore del congresso: Theoretical concepts and recent experimental results on cold molecules, Volterra, Italy, (Settembre 22-27).

Seminari e Comunicazioni Orali

- 2023 Keynote speaker: *Computational modeling of new generation batteries: a study of parasitic chemistries and of electrolytes properties.*, XLIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica, Torino, (4-7 settembre 2023)
- 2023 Invited Lecture: *Investigating gas-phase reactive pathways toward polyatomic molecules in the interstellar medium*, Winter Modeling 2023 - New frontiers in astrochemistry and astrobiology, Napoli (22-23 febbraio 2023).
- 2022 Invited lecture: *Computational approaches for biocompatible ionic liquids.*, VII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, Modena (21-24 settembre 2022).
- 2022 Invited lecture: *Computational studies of the reactive pathways leading to the parasitic release of singlet oxygen in metal-air batteries*, XLVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana, Genova (4-7 luglio 2022).
- 2022 Presentazione Orale: *Biocompatible and green ionic liquids: a computational description, challenges and perspectives*, XIII Convegno INSTM sulla Scienza e Tecnologia dei Materiali, Sestriere (TO) (23-26 gennaio 2022).

- 2021 Seminario su invito: *Isomerization patterns and proton transfer in ionic liquids: crossing the boundary between the ionic and neutral phase*. Helmholtz Institute Ulm (HIU) Electrochemical Energy Storage Ulm, Germany. (3 Novembre, 2021).
- 2020 Presentazione Orale: *Isomerization patterns and proton transfer in ionic liquids: toward new conducting media*, Workshop of the division of Physical Chemistry of the Italian Chemical Society (14-15 Dicembre 2020)
- 2018 Presentazione Orale: *Isomerization patterns and proton transfer in the molecular constituents of protic ionic liquids probed by ab-initio computations*. 6th International Conference on Ionic Liquids for Electrochemistry, Rome, Italy (ILED-6) (Settembre 9-11, 2018).
Invited lecture: *New insights in protic ionic liquids from theoretical calculations*. International Workshop on Soft Matter and Biophysics Theories, Beijing, China (Gennaio 28-31, 2018).
- 2017 Presentazione Orale: *Proton Mobility in Protic Ionic Liquids: New Results from Theoretical Calculations* XXIX IUPAP Conference in Computational Physics (CCP2017), University Pierre et Marie Curie - Sorbonne, Paris, France (Luglio 9-13, 2017)
- 2017 Presentazione Orale: *Proton mobility in protic Ionic Liquids*. III Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale, Pisa, Italy (Ottobre 2-5, 2016).
- 2016 Presentazione Orale: *The structure of ionic liquids from molecular dynamics: recent results*. International Meeting on Ionic Liquids for Electrochemical Devices ILED, Rome, Italy (Luglio 11-13 2016).
- 2015 Invited lecture: *The Structure of Ionic Liquids from Molecular Dynamics: Recent Results*. XVIII – Simposio Brasileiro de Quimica Teorica, Pirenopolis, Goias, Brasil (Novembre 22-25 2015).
Presentazione Orale: *Ionic liquids from a molecular perspective*. CMAST Workshop: Computational Materials Science and Technology. CRESCOENEA, Italy, (Aprile 13, 2015).
- 2014 Presentazione Orale: *Amino Acid Anions in Organic Ionic Compounds: Charting the Boundary of Room Temperature Ionic Liquids*. Winter Modeling, Modena, Italy (Marzo 13-14, 2014).
- 2013 Presentazione Orale: *Ionic liquids from a molecular perspective*. XLI Congresso della Divisione di Chimica Fisica, Alessandria, Italy. (Giugno 25-27, 2013).
Presentazione Orale: *Ionic liquids from a molecular perspective*. II Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale, Padova, Italy (Febbraio 20-22, 2013).
- 2012 Seminario su invito: *The Structure of Ionic Liquids from a Molecular Perspective*. The Analysis and Modeling laboratory for Biology and Environment (LAMBE), Univ. of Évry-val-d'Essonne, Evry Cedex, France, (Novembre 2012).
- 2011 Presentazione Orale: *The structure of ionic liquids based on geminal imidazolium: a theoretical study*. XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Lecce, Italy (Settembre 11-16, 2011).
Presentazione Orale: *Theoretical simulations of ionic liquids*. 110th Bunsentagung (Annual German Conference on Physical Chemistry), invitation in the special EuChemMS session, Freien Universität Berlin, Germany (Giugno 2-4, 2011)
- 2010 Presentazione Orale: *Atomistic Simulation of Ionic Liquids: Dissecting Their Local Structure with Combined Experimental and Theoretical Determinations*. XXXIX Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica, Stresa, Italy (Settembre 20-24, 2010).
Presentazione Orale: *Atomistic simulations of imidazolium-based ionic liquids: current challenges for theoretical models*. International conference on Ionic Liquids for Electrochemical Devices (ILED-2), CNR, Roma, Italy (Settembre 2010).
Presentazione Orale: *The stereochemistry of sulphoxides: theoretical treatment of the inversion process*. 8th workshop on Molecular Theories and simulations, Gaeta, Italy (Maggio 24-26 2010).
- 2009 Seminario su invito: *Low and Ultra-low energy chemical processes involving ions*. Dipartimento di Scienze Chimiche, University of Trieste, Trieste, Italy. (December 1, 2009).
Presentazione Orale: *Atomic and Molecular dopants in He nanodroplets*. Control Of Molecular Processes Induced by Electrons and Photons: A Congress in honor of Prof. Hotop, Accademia Nazionale dei Lincei "Centro Beniamino Segre", Rome, Italy (October 2-4, 2008).

- 2008 Presentazione Orale: *Ultra cold ion atom and ion molecule collisions: dynamics, chemical reactions and charge exchange*. MOLEC XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems, St. Petersburg, Russia (August 23-28, 2008)
- 2007 Presentazione Orale: *Quantum stochastic treatment of ionic microsolvation in 4He droplets Molecular Quantum Mechanics: New Models for New Experiments*. Accademia Nazionale dei Lincei "Centro Beniamino Segre", Rome, Italy (May 3-4, 2007).
- 2005 Seminario su invito: *Ultra-low Temperature Chemistry in ionic systems*. Laboratoire Aimé Cotton, Université Paris Sud, Orsay, France (September 27, 2005).
Presentazione Orale: *Modelling reactive and inelastic dynamics when nearing the nanokelvin regimes: predictions for magneto-optical trap experiments*. ESF driven workshop on a european cyberinfrastructure, Accademia dei Lincei, Rome, Italy (July 12-13, 2005).
- 2005 Lezione: *Atom-Molecule Reactive Scattering*. European Winter School on Theoretical Methods, Prague (February 14-18, 2005).
- 2004 Presentazione Orale: *Ultra-cold collision dynamics involving molecular systems*. ECAMP VIII, 8th European Conference on Atomic and Molecular Physics, Rennes, France (July 6-10, 2004).
Presentazione Orale: *Enhanced chemical reactivity at ultra-low energy*. International conference, Bose-Einstein Condensation: from Atoms to Molecules, Durham, UK (30 March-3 April 2004).
- 2003 Lezione: *Inelastic and reactive quantum processes*. Network training school & workshop in Volterra, Italy (September 22-27, 2003).
- 2002 Presentazione Orale: *Molecular Dynamics and Chemistry at Ultra-Low Temperature*. MOLEC XIV: European Conference on Dynamics of Molecular Collisions, Koc University, Istanbul, Turkey (31 August-6 September 2002).

LISTA DELLE PUBBLICAZIONI

149. M. Salha, H. Adenusi, J. H. Dupuis, E. Bodo, B. Botta, I. McKenzie, R. Y. Yada, D. H. Farrar, J. Magolan, K. V. Tian, G. A. Chass, *Bioactivity of the cannabigerol cannabinoid and its analogues – the role of 3-dimensional conformation*, *Org. Biomol. Chem.*, (2023)
<https://doi.org/10.1039/D3OB00383C>
148. G. Dilena, S. Pistillo and E. Bodo*, *About the Formation of NH₂OH⁺ from Gas Phase Reactions under Astrochemical Conditions*, *Molecules*, **28**, 2932, (2023)
<https://doi.org/10.3390/molecules28072932>
147. M. S. Salha, R. Y. Yada, D. H. Farrar, G. A. Chass, K. V. Tian and E. Bodo, *Aluminium catalysed oligomerisation in cement-forming silicate systems*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **25**, 455-461 (2023)
<https://doi.org/10.1039/d2cp03918d>
-
146. Y. Jiang, S. Indrajith, A. F. P. Mellor, T. Bürgi, M. Lecouvey, C. Clavaguéra, E. Bodo, C. Houée-Levin, E. Loire, G. Berden, J. Oomens, and D. Scuderi, *Final Products of One-Electron Oxidation of Cyclic Dipeptides Containing Methionine Investigated by IRMPD Spectroscopy: Does the Free Radical Choose the Final Compound?*, *J. Phys. Chem. B*, **126**, 10055–10068 (2022)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c06541>
145. A. Di Sabato, F. D'Acunzo, D. Filippini, F. Vetica, A. Brasiello, D. Corinti, E. Bodo, C. Michenzi, E. Panzetta, and P. Gentili, *Unusually Chemoselective Photocyclization of 2-(Hydroxyimino)aldehydes to Cyclobutanol Oximes: Synthetic, Stereochemical, and Mechanistic Aspects*, *J. Org. Chem.* (2022), **87**, 13803–13818
<https://doi.org/10.1021/acs.joc.2c01503>
144. M. Fuse, G. Longhi, G. Mazzeo, S. Stranges, F. Leonelli, G. Aquila, E. Bodo, B. Brunetti, C. Bicchi, C. Cagliero, J. Bloino, and S. Abbate *Anharmonic Aspects in Vibrational Circular Dichroism Spectra from 900 to 9000 cm⁻¹ for Methyloxirane and Methylthiirane*, *J. Phys. Chem. A*, **126**, 6719–6733, (2022)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c05332>
143. S. Russo, E. Bodo*, *A polarisable force field for bio-compatible ionic liquids based on amino acids anions*, *Mol. Simul.*, **48**, 1650-1659 (2022)
<https://doi.org/10.1080/08927022.2022.2113810>
142. V. Piacentini, A. Le Donne, S. Russo and E. Bodo*, *A Computational Analysis of the Reaction of SO₂ with Amino Acid Anions: Implications for Its Chemisorption in Biobased Ionic Liquids* *Molecules*, **27**, 3604, (2022)
<https://doi.org/10.3390/molecules27113604>
141. P. O'Keeffe, D. Catone, S. Turchini, A. Paladini, A. Dalla Cort, E. Bodo and S. Piccirillo, *Excited state dynamics of Zn–salophen complexes*, *Photochem. Photobiol. Sci.*, **21**, 923–934, (2022)
<https://doi.org/10.1007/s43630-021-00165-0>
140. E. Bodo*, *Perspectives in the Computational Modeling of New Generation, Biocompatible Ionic Liquids*, *J. Phys. Chem. B*, **126**, 3–13 (2022)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c09476>
139. A. Le Donne, S. Russo, E. Bodo*, *Assessing the Propensity Toward Ionization in Nanosized Clusters of Protic Ionic Liquids by Ab-initio Methods*, *Chem. Phys.*, **552**, 111365 (2022)
<https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2021.111365>
-
138. (Editorial) E. Bodo *Welcome to Liquids: An Open Access Journal*, *Liquids*, **1**, 75-76 (2021)
137. A. Pierini, S. Brutti, and E. Bodo*, *Reactions in non-aqueous alkali and alkaline-earth metal-oxygen batteries: a thermodynamic study*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **23**, 24487 - 24496 (2021)
<https://doi.org/10.1039/D1CP03188K>
136. A. Pierini, S. Brutti, and E. Bodo*, *Study of the Electronic Structure of Alkali Peroxides and Their Role in the Chemistry of Metal–Oxygen Batteries*, *J. Phys. Chem. A*, **125**, 9368–9376 (2021)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c07255>
135. A. Pierini, S. Brutti and E. Bodo*, *Reactive pathways toward parasitic release of singlet oxygen in metal-air batteries*, *npj Computational Materials* **7**, 126 (2021)
<https://doi.org/10.1038/s41524-021-00597-3>
134. F. Ripanti, C. Fasolato, F. Mazzarda, S. Palleschi, M. Ceccarini, C. Li, M. Bignami, E. Bodo, S. E. J. Bell, F. Mazzei, and P. Postorino, *Advanced Raman Spectroscopy Detection of Oxidative Damage in Nucleic Acid Bases: Probing Chemical Changes and Intermolecular Interactions in Guanosine at Ultralow Concentration*, *Anal. Chem.*, **93**, 10825-10833, (2021).
<https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c01049>
133. S. Onofri and E. Bodo* *CO₂ Capture in Biocompatible Amino Acid Ionic Liquids: Exploring the Reaction Mechanisms for Bimolecular Absorption Processes*, *J. Phys. Chem. B*, **125**, 5611–5619, (2021).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c02945>

132. A. Le Donne, H. Adenusi, F. Porcelli and E. Bodo*, *Hydrogen bonding in biocompatible ionic liquids: an ab-initio characterization of dimeric interactions*, *Electronic Structure*, **3**, 025004, (2021).
<https://doi.org/10.1088/2516-1075/abfd21>
131. E. Bodo*, *Modelling biocompatible ionic liquids based on organic acids, and amino acids: challenges for computational models and future perspectives*, *Org. Biomol. Chem.*, **19**, 4002-4013, (2021).
<https://doi.org/10.1039/D1OB00011J>
130. A. Le Donne, E. Bodo*, *Cholinium amino acid-based ionic liquids*, *Biophys Rev*, **13**, 147-160, (2021).
<https://doi.org/10.1007/s12551-021-00782-0>
129. E. Bodo*, M. Bonomo, and A. Mariani, *Assessing the Structure of Protic Ionic Liquids Based on Triethylammonium and Organic Acid Anions*, *J. Phys. Chem. B*, **125**, 2781–2792, (2021)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c00249>
-
128. S. Onofri, A. Le Donne, H. Adenusi, E. Bodo* *CO₂ Capture in Ionic Liquids Based on Amino Acid Anions With Protic Side Chains: a Computational Assessment of Kinetically Efficient Reaction Mechanisms*, *ChemistryOpen*, **9**, 1153 – 1160 (2020).
<https://doi.org/10.1002/open.202000275>
127. A. Pierini, S. Brutti and E. Bodo* *Superoxide Anion Disproportionation Induced by Li⁺ and H⁺: Pathways to ¹O₂ Release in Li-O₂ Batteries*, *ChemPhysChem*, **21**, 2060 – 2067 (2020).
<https://doi.org/10.1002/cphc.202000318>
126. H. Adenusi, G. Chass and E. Bodo* *Theoretical Insights into the Structure of the Aminotris(Methylene-phosphonic Acid) (ATMP) Anion: A Possible Partner for Conducting Ionic Media*, *Symmetry*, **12**, 920 (2020).
<https://doi.org/10.3390/SYM12060920>
125. H. Adenusi, A. Le Donne, F. Porcelli and E. Bodo* *Ab Initio Molecular Dynamics Study of Phospho-Amino Acid-Based Ionic Liquids: Formation of Zwitterionic Anions in the Presence of Acidic Side Chains*, *J. Chem. Phys. B.*, **124**, 1955-1964, (2020).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b09703>
124. E. Bodo*, *Structural Features of Triethylammonium Acetate through Molecular Dynamics*, *Molecules*, **25**, 1432 (2020).
<https://doi.org/10.3390/molecules25061432>
-
123. E. Bodo*, G. Bovolenta, C. Simha, R. Spezia *On the formation of propylene oxide from propylene in space: gas-phase reactions*, *Theor. Chem. Acc.*, **138**, 97 (2019).
<https://doi.org/10.1007/s00214-019-2485-3>
122. A. Le Donne, H. Adenusi, F. Porcelli and E. Bodo* *Structural Features of Cholinium Based Protic Ionic Liquids through Molecular Dynamics*, *J. Phys. Chem. B*, **123**, 5568-5576 (2019).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b03314>
121. A. Ciavardini, M. Coreno, C. Callegari, C. Spezzani, G. De Ninno, B. Ressel, C. Grazioli, M. de Simone, A. Kivimaki, P. Miotti, F. Frassetto, L. Poletto, C. Puglia, S. Fornarini, E. Bodo, M. Pezzella and S. Piccirillo, *Ultra-Fast-VUV Photoemission Study of UV Excited 2-Nitrophenol*, *J. Phys. Chem. A*, **123**, 1295-1302 (2019).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.8b10136>
120. D. Corinti, A. Maccelli, B. Chiavarino, P. Maitre, D. Scuderi, E. Bodo, S. Fornarini, and Maria Elisa Crestoni *Vibrational signatures of curcumin's chelation in copper(II) complexes: An appraisal by IRMPD spectroscopy* *J. Chem. Phys.* **150**, 165101 (2019).
<https://doi.org/10.1063/1.5086666>
119. B. D. Linford, A. Le Donne, D. Scuderi, E. Bodo and Travis D Fridgen, *Strong intramolecular hydrogen bonding in protonated b-methylaminoalanine: A vibrational spectroscopic and computational study*, *Eur. J. Mass Spectr.*, **25**, 133-141, (2019).
<https://doi.org/10.1177/1469066718791998>
-
118. A. Le Donne, H. Adenusi, F. Porcelli, and E. Bodo*, *Hydrogen Bonding as a Clustering Agent in Protic Ionic Liquids: Like-Charge vs Opposite-Charge Dimer Formation*, *ACS Omega* **3**, 10589-10600, (2018).
<https://doi.org/10.1021/acsomega.8b01615>
117. M. C. Castrovilli, P. Bolognesi, E. Bodo, G. Mattioli, A. Cartonib and L. Avaldi *An experimental and theoretical investigation of XPS and NEXAFS of 5-halouracils*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 6657, (2018).
<https://doi.org/10.1039/c8cp00026c>
116. M. Campetella, A. Le Donne, M. Daniele, L. Gontrani, S. Lupi, E. Bodo* and F. Leonelli, *Hydrogen Bonding Features in Cholinium-Based Protic Ionic Liquids from Molecular Dynamics Simulations*, *J. Phys. Chem. B*, **122**, 2635-2645, (2018).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b12455>
115. E. Bodo*, A. Le Donne *Isomerization patterns and proton transfer in ionic liquids constituents as probed by ab-initio computation*, *J. Mol. Liq.*, **249**, 1075-1082 (2018).
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.11.152>

-
114. M. Montagna, R. Spezia, E. Bodo* *Solvation Properties of the Actinide Ion Th(IV) in DMSO and DMSO:Water Mixtures through Polarizable Molecular Dynamics*, Inorg. Chem. **56**, 11929-11937 (2017).
<https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b01900>
113. A. Ciavardini, S. Fornarini, A. Dalla Cort, S. Piccirillo, D. Scuderi, and E. Bodo* *Experimental and Computational Investigation of Salophen-Zn Gas Phase Complexes with Cations: A Source of Possible Interference in Anionic Recognition*, J Phys. Chem. A **121**, 7042-7050, (2017).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b05825>
112. M. Montagna, R. Spezia and E. Bodo*, *Structural and energetic properties of La³⁺ in water/DMSO mixtures*, J. Mol. Struct. **1148**, 381-387, (2017).
<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.07.068>
111. M. Campetella, M. Montagna, L. Gontrani, E. Scarpellini and E. Bodo*, *Unexpected Proton Mobility in the bulk phase of Cholinium-based Ionic Liquids. New Insights from Theoretical Calculations*, Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 11869 - 11880, (2017).
<https://doi.org/10.1039/c7cp01050h>
110. A. Ciavardini, A. Dalla Cort, S. Fornarini, D. Scuderi, A. Giardini, G. Forte, E. Bodo* *Adenosine monophosphate recognition by zinc-salophen complexes: IRMPD spectroscopy and quantum modeling study*, J. Mol. Spectr., **335**, 108-116, (2017).
<https://doi.org/10.1016/j.jms.2017.02.014>
-
109. D. Scuderi, E. Bodo, B. Chiavarino, S. Fornarini, M. E. Crestoni *Amino-acids oxidation: a combined study of cysteine oxo-forms by IRMPD spectroscopy and simulations*, Chem. Eur. J. **22**, (2016).
<https://doi.org/10.1002/chem.201603298>
108. Allegretti, M., Aramini A., Barile F., Bodo E., Daidone I., Guzzo T., Mandaliti W, Nepravishta R.,f, Topai A. and Paci M. *The conformational change in the mechanism of host-guest inclusion complex of Ketoprofen in cyclodextrin : NMR spectroscopy, ab initio calculations, molecular dynamics simulations and photoreactivity*, J. Phys. Chem. B, **120**, 10668-10678 (2016).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b07913>
107. M. Campetella, E. Bodo*, M. Montagna, S. De Santis and L. Gontrani *Theoretical study of ionic liquids based on the cholinium cation. Ab initio simulations of their condensed phases*, J. Chem. Phys. **144**, 104504 (2016).
<https://doi.org/10.1063/1.4943197>
106. M. Montagna, Y. Jeanvoine, R. Spezia and E. Bodo* *Structure, Stability and Electronic Properties of DMSO and DMF clusters containing Th⁴⁺*. J. Phys. Chem. A **120**, 4778-4788 (2016).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5b12007>
-
105. E. Bodo*, R. Spezia and V. Macaluso, *Solvent Structure Around Lanthanoids(III) Ions in Liquid DMSO as Revealed by Polarizable Molecular Dynamics Simulations*, J. Phys. Chem. B., **119**, 13347-13357 (2015).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06317>
104. E. Bodo*, *Lanthanum(III) and Lutetium(III) in Nitrate-based Ionic Liquids: A Theoretical Study of Their Coordination Shell* J. Phys. Chem. B., **119**, 11833-11838 (2015).
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06387>
103. M. Campetella, E. Bodo*, R. Caminiti, A. Martino, F. D'Apuzzo, S. Lupi and L. Gontrani *Interaction and dynamics of ionic liquids based on Choline and amino-acids anions*. J. Chem. Phys., **142**, 234502 (2015).
<https://doi.org/10.1063/1.4922442>
-
102. E. Bodo, M. Chiricotto, R. Spezia, *Structural, Energetic and Electronic Properties of La(III)-DMSO Clusters*, J. Phys. Chem. A, **118**, 11602-11611, (2014)
101. E. Bodo, A. Ciavardini, A. Dalla Cort, I. Giannicchi, F. Yafteh Mihan, S. Fornarini, S. Vasile, D. Scuderi, S. Piccirillo, *Anion recognition by uranyl-salophen derivatives as probed by IRMPD spectroscopy and ab-initio modeling*. Chem. Eur. J., **20**, 11783 - 11792, (2014).
100. M. P. Donzello, G. De Mori, D. Futur, Z. Fu, M. L. Astolfi, C. Rizzoli, C. Ercolani, a. L. Mannina, E. Bodo*, and K. M. Kadish, *UV-Visible, Experimental and DFT/Time-Dependent DFT Studies on Neutral and One-Electron-Reduced Quinoxaline and Pyrazine Precursors and Their Mononuclear (Pd^I, Pt^I) Derivatives*, Eur. J. Inorg. Chem., **2014**, 3572-3581, (2014).
99. A. Benedetto, E. Bodo*, L. Gontrani, P. Ballone and R. Caminiti, *Amino-acid anions in organic ionic compounds. An ab-initio study of selected ion pairs*, J. Phys. Chem. B, **118**, 2471, (2014).
98. E. Bodo, S. Mangialardo, F. Capitani, L. Gontrani, F. Leonelli, and P. Postorino *Interaction of a Long Alkyl Chain Protic Ionic Liquid and Water*, J. Phys. Chem., **140**, 204503, (2014).
97. C. Battocchio, I. Fratoddi, L. Fontana, E. Bodo, F. Porcaro, C. Meneghini, I. Pisc, S. Nappini, S. Mobilio, M.V. Russo, G. Polzonetti *Silver nanoparticles linked by Pt-containing organometallic dithiol bridge: study on local structure and interface by XAFS and SR-XPS*, Phys. Chem. Chem. Phys. **16** 11719-28, (2014)
-

96. S. Piccirillo, A. Ciavardini, E. Bodo, F. Rondino, D. Scuderi, V. Steinmetz, A. Paladini, *Probing the competition among different coordination motifs in metal - ciprofloxacin complexes through IRMPD spectroscopy and DFT calculations* Inorg. Chem., **52**, 103-112, (2013).
95. M. Alagia, E. Bodo*, P. Decleva, S. Falcinelli, A. Ponzi, R. Richter and S. Stranges* *Soft x-ray absorption spectrum of the allyl free radical*, Phys. Chem. Chem. Phys., **15**, 1310-1318, (2013).
94. A. Ruggi, R. Cacciapaglia, S. Di Stefano, E. Bodo, F. Ugozzoli, *Naphthalenophane Formaldehyde Acetals as Candidate Structures for the Generation of Dynamic Libraries via Transacetalation Processes*, Tetrahedron, **69**, 2767-2774, (2013).
93. M. Campetella, L. Gontrani, E. Bodo, F. Ceccacci, F. C. Marincola, R. Caminiti *Conformational Isomerisms and Nano-Aggregation in Substituted Alkylammonium Nitrates Ionic Liquids: an X-ray and Computational Study of 2-OMeEAN* J. Chem. Phys. **138**, 184506, (2013)
92. E. Bodo*, S. Mangialardo, P. Postorino, A. Sferrazza, and R. Caminiti, *A Prototypical Ionic Liquid Explored by Ab-initio Molecular Dynamics*, J. Chem. Phys. **139**, 144309 (2013)
-
91. E. Bodo, A. Ciavardini, A. Giardini, A. Paladini, S. Piccirillo, F. Rondino, D. Scuderi, *Infrared Multiple Photon Dissociation Spectroscopy of Ciprofloxacin: Investigation of the Protonation Site*, Chem. Phys., **398**, 124 (2012).
90. I. Fratoddi, E. S. Bronze-Uhle, A. Batagin-Neto, D. M. Fernandes, E. Bodo, C. Battocchio, I. Venditti, F. Decker, M.V. Russo, G. Polzonetti, C. F. O. Graeff, *Structural Changes of conjugated Pt-containing polymetallaynes exposed to gamma-ray radiation doses*, J. Phys. Chem C, **116**, 8768 (2012)
89. E. Bodo*, S. Mangialardo, F. Ramondo, F. Ceccacci, and P. Postorino, *Unravelling the Structure of Protic Ionic Liquids with Theoretical and experimental methods: Ethyl-, Propyl- and Butyl Ammonium Nitrate Explored by Raman spectroscopy and DFT calculations* J. Phys. Chem. B, **116**, 13878-13888 (2012).
88. L. Gontrani, E. Bodo*, A. Triolo, F. Leonelli, P. D'Angelo, V. Migliorati, R. Caminiti. *The interpretation of diffraction patterns of Protic Ionic Liquids: a challenging task for classical molecular dynamics simulations*, J. Phys. Chem. B, **116**, 13024-13032 (2012)
-
87. O. Lanzalunga, L. Mandolini, S. Di Stefano, M. Mazzonna, E. Bodo, *Photoinversion of Sulfoxides as a Source of Diversity in Dynamic Combinatorial Chemistry* Org. Lett., **13**; 142-145, (2011).
86. A. Batagin-Neto, E. Bronze-Uhle, D. Fernandes, I. Fratoddi, I. Venditti, F. Decker, E. Bodo, M.-V. Russo, C. Graeff, *Optical Behavior of Conjugated Pt-containing Polymetallaynes Exposed to Gamma-ray Radiation Doses*, J. Phys Chem C, **115**, 8047 (2011).
85. P. D'angelo, A. Zitolo, V. Migliorati, E. Bodo, G. Aquilanti, J.-L. Hazemann, D. Testemale, G. Mancini, R. Caminiti, *X-Ray absorption spectroscopy investigation of 1-alkyl-3-methylimidazolium bromide salts* J. Chem. Phys., **135**, 074505 (2011).
84. P. Zhang, A. Dalgarno, R. Coté, E. Bodo*, *Charge exchange in collisions of Beryllium with its ion*. Phys. Chem. Chem. Phys., **13**, 19026-19035 (2011).
83. M.-P. Donzello, G. De Mori, C. Ercolani, E. Bodo, L. Mannina, D. Capitani, C. Rizzoli, L. Gontrani, G. Aquilanti, K. M. Kadish, P. D'Angelo, *Structural Flexibility and Role of Vicinal 2-Thienyl Rings in 2,3-Dicyano-5,6-di(2-thienyl)-1,4-pyrazine, [(CN)2Th2Pyz], its Palladium(II) Complex [(CN)2Th2Pyz(PdCl2)2] and the Related Pentametalllic Pyrazinoporphyrazines [(PdCl2)4Th8TPyzPzM] (M = MgII(H2O), ZnII)*, Inorg. Chem. **50**, 12116-12125, (2011).
82. E. Bodo*, P. Postorino, S. Mangialardo, G. Piacente, F. Ramondo, F. Bosi, P. Ballirano, and R. Caminiti, *The Structure of the Molten Salt Methyl Ammonium Nitrate Explored by Experiments and Theory*, J. Phys. Chem. B, **115** (2011), 13149-13161.
81. E. Bodo*, M. Chiricotto and R. Caminiti, *The Structure of Geminal Imidazolium Bis(trifluoromethanesulfonyl)imide Dicationic Ionic Liquids: a Theoretical Study of the Liquid Phase*, J. Phys. Chem. B **115**, 14341-14347, (2011).
-
80. E. Bodo*, L. Gontrani, A. Triolo, and R. Caminiti *Structural determination of Ionic Liquids with theoretical methods: C₃mimBr and C₈mimCl. Strength and weakness of current force fields*. J. Phys. Chem. Lett. **1**, 1095-1100 (2010).
79. E. Bodo* and G. Lanaro *Theoretical treatment of the electronic excited states of the DMSO molecule: a challenge for current theoretical method*, Chem. Phys **337**, (2010), 136-141.
78. E. Bodo* and R. Caminiti *The Structure of Geminal Imidazolium Bis-(trifluoromethyl-sulfonyl)amide Ionic Liquids: a Theoretical Study of the Gas Phase Ionic Complexes*, J. Phys. Chem. A, **114**, 12506, (2010)
77. E. Bodo*, L. Gontrani, R. Caminiti, N. V. Plechkova, K. R. Seddon and A. Triolo, *Structural properties of 1-alkyl-3-methylimidazolium bis{(trifluoromethyl)sulfonyl}amide ionic liquids: X-ray Diffraction Data and Molecular Dynamics Simulations* J. Phys. Chem. B, **114**, 16398, (2010).
-
76. E. Coccia, E. Bodo, and F. A. Gianturco *Size-dependent solvation of p-H2 in 4He clusters: A quantum Monte Carlo analysis* J. Chem. Phys. **130**, 094906 (2009)

75. M. Wernli, E. Scifoni, E. Bodo, F.A. Gianturco *A quantum modeling of the chemistry of LiH⁺ with He from ab initio calculations: Ionic reactions in He nanodroplets* Int. J. of Mass Spectr., **280**, 57, (2009)
74. M. Wernli, D. Caruso, E. Bodo, and F. A. Gianturco *Computing a three-dimensional electronic energy manifold for the LiH + H \rightleftharpoons Li + H₂ chemical reaction* J. Phys. Chem A, **113**, 1121, (2009)
73. S. Bovino, E. Coccia, E. Bodo, D. Lopez-Duraán and F. A. Gianturco *Spin-driven structural effects in alkali doped ⁴He clusters from quantum calculations*, J. Chem. Phys. **130**, 224903 (2009)
72. P. Zhang, E. Bodo, and A. Dalgarno *Near Resonance Charge Exchange in Ion-Atom Collisions of Lithium Isotopes* J. Phys. Chem. A **113** 15085 (2009).
71. E. Bodo*, *Low and Ultra-low energy chemical processes involving ions* Phys. Scripta., **80**, 048117, (2009)
-
70. E. Bodo* P. Zhang, A. Dalgarno, *Ultra-cold ion-atom collisions: near resonant charge exchange*. New J. Phys., **10**, 033024 (2008)
69. E. Coccia, F. Marinetti, E. Bodo, and F.A. Gianturco *Anionic microsolvation in helium droplets: (OH⁻)(He)_N structures from classical and quantum calculations*, J. Chem. Phys., **128**, 134511 (2008).
68. S. Bovino, E. Bodo, and F.A. Gianturco *Ultralow energy vibrational quenching in ionic collisions: Isotope effects in Li⁺+D₂ encounters* by. Phys Rev. A, **77**, 042716 (2008)
67. E. Coccia, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Nanoscopic phase changes in doped ⁴He droplets*. Eur. Phys. Lett., **82**, 23001, (2008)
66. L. González-Sánchez, E. Bodo, E. Yurtsever, F.A. Gianturco, *Quenching efficiency of hot polar molecules by He buffer gas at ultralow energies: quantum results for MgH and LiH rotations*. Eur Phys J. D **48**, 75 (2008)
65. F. Leonelli, M. Capuzzi, E. Bodo, P. Passacantilli and G. Piancatelli, *Synthesis of New 2-Phosphono-alpha-D-Glycoside derivatives by Stereoselective Oxa-Michael Addition to D-Galacto Derived Enone* CARBO-HYD RES, **343**, 1133, (2008)
64. S. Bovino, E. Bodo, E. Yurtsever, and F.A. Gianturco, *Vibrational cooling of spin-stretched dimer states by He buffer gas: Quantum calculations for Li₂(a³Σ_u⁺) at ultralow energies*, J. Chem. Phys, **128**, 224312, (2008)
63. L. González-Sánchez, M. Tacconi, E. Bodo, and F.A. Gianturco, *Ionic interactions and collision dynamics in cold traps: rotational quenching of OH⁻ (¹Σ⁺) by Rb(²S)*, Eur. Phys. J. D, **49**, 85-92, (2008)
62. E. Coccia, F. Marinetti, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Chemical solutions in a quantum solvent: anionic "electrolytes" in ⁴He nanodroplets*, ChemPhysChem, **9**, 1323-1330, (2008)
61. D. López-Dúran, E. Bodo, F. A. Gianturco, *ASPIN: an all spin scattering code for atom molecule rovibrationally inelastic cross sections* Comp. Phys. Comm. **179**, 821 (2008)
60. F. Marinetti, E. Bodo, E. Yurtsever, F. A. Gianturco, *Energetics and structures of charged helium clusters: comparing stabilities of dimer and trimer cationic cores*, ChemPhysChem **9**, 2618, (2008)
-
59. F. Marinetti, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Microsolvation of an ionic Dopant in small ⁴He clusters: OH⁺ (³Σ)(⁴He)_n via Genetic Algorithm Optimizations*. ChemPhysChem, **8**, 93, (2007)
58. E. Bodo, F.A. Gianturco, *Quenching of vibrationally excited molecules by ultracold collisions with ions: Controlling the scattering via changes of internal states* Eur. Phys. Lett. **77**, 33001 (2007)
57. M. Tacconi, E. Bodo, F.A. Gianturco, *Sympathetic cooling of NH(X³Σ) molecules by Rb and Cs atoms at ultralow energies* Phys. Rev. A, **75**, 012708, (2007)
56. E. Coccia, E. Bodo, F. Marinetti, F. A. Gianturco, E. Yildirim, M. Yurtsever and E. Yurtsever, *Bosonic helium droplets with cationic impurities: Onset of electrostriction and snowball effects from quantum calculations*, J. Chem. Phys., **126**, 124319, (2007).
55. M. Tacconi, E. Bodo and F.A. Gianturco, *Interaction of NH(³XΣ⁻) with Rb and Cs atoms: similarities and differences from an highly correlated ab initio study* Theor. Chem. Acc., **117**, 649-662, (2007)
54. E. Yurtsever, E. Yildirim, M. Yurtsever, E. Bodo, and F. A. Gianturco, *Solvation of K⁺ in Helium droplets*, Eur. Phys. J. D, **43**, 105, (2007)
53. L. González-Sánchez, E. Bodo and F.A. Gianturco, *Quenching of molecular ions by He buffer loading at ultralow energies: rotational cooling of OH⁺ (³Σ⁻) from quantum calculations*, Eur Phys. J. D, **44**, 65, (2007)
52. F. Marinetti, E. Coccia, E. Bodo F. A. Gianturco, E. Yurtsever, M. Yurtsever, E. Yildirim, *Bosonic Helium Clusters Doped by Alkali Cations: Interaction Forces and Analysis of Their Most Stable Structures*, Theor. Chem. Acc., **118**, 53, (2007)
51. M. Tacconi, L. Gonzalez-Sanchez, E. Bodo, F.A. Gianturco, *Collisions of NH(³Σ⁻) with Rb and Cs at ultralow energies: A quantum study of rotational cooling efficiency*, Phys. Rev. A, **76**, 032702 (2007)
50. M. Wernli, E. Bodo and F.A. Gianturco, *Rotational cooling efficiency upon molecular ionization: the case of Li₂ (a³Σ_u⁺) and Li₂⁺ (X²Σ_g⁺) interacting with ⁴He*, Eur. Phys. J. D, **45**, 267-272, (2007)

49. S. Bovino, E. Bodo, and F.A. Gianturco, *Collisional quenching at ultralow energies: Controlling efficiency with internal state selection*, J. Chem. Phys., **127**, 224303 (2007).
48. B. C. Shepler, B. H. Yang, T. J. Dhillip Kumar, P. C. Stancil, J. M. Bowman, N. Balakrishnan, P. Zhang, E. Bodo, and A. Dalgarno, *Low energy H+CO scattering revisited: CO rotational excitation with new potential surfaces*, Astronomy and Astrophysics, **475** L15-L18, (2007).
47. F. Marinetti, Ll. Uranga-Pina, E. Coccia, D. López-Durán, E. Bodo, and F. A. Gianturco, *Microsolvation of cationic dimers in ^4He droplets: geometries of A_2^+ (He)_N (A = Li, Na, K) from optimized energies.*, J. Phys. Chem. A, **111**, 12289, (2007)
46. L. González-Sánchez, E. Bodo, F. A. Gianturco, *Collisional quenching of rotations in lithium dimers by ultracold helium: the Li_2 ($a^3\Sigma_u^+$) and Li_2 ($X^1\Sigma_g^+$) targets*, J. Chem. Phys., **127**, 244315 (2007)
45. E. Bodo, E. Coccia, D. López-Durán, and F. A. Gianturco, *Ionic dopants in He droplets: cluster energies from a variational and diffusion Monte Carlo approach*, Phys. Scripta., **76**, C104-C110, (2007)
-
44. F. Sebastianelli, I. Baccarelli, E. Bodo, C. Di Paola, F. A. Gianturco and M. Yurtsever, *Microsolvation of Li^+ in Bosonic Helium Clusters. I: Many body effects on the structures of the small aggregates*, Computational Materials Science **35**, 261-267, (2006).
43. E. Bodo, M. Lara and F. A. Gianturco, *Isotopic replacement in ionic systems: the $^4\text{He}_2^+ + ^3\text{He} \rightarrow ^3\text{He}^4\text{He}^+ + ^4\text{He}$ reaction*, J. Chem. Phys. **124**, 044308 (2006).
42. E. Bodo, E. Yurtsever, M. Yurtsever and F. A. Gianturco, *Ionic dimers in He droplets: interactions potentials for $\text{Li}_2^+ - \text{He}$, $\text{Na}_2^+ - \text{He}$ and $\text{K}_2^+ - \text{He}$ and stability of the smaller clusters*, J. Chem. Phys. **124**, 074320 (2006).
41. L. González-Sánchez, E. Bodo, F. A. Gianturco, *Quantum scattering of $\text{OH}(X^2\Pi)$ with $\text{He}(^1S)$: propensity features in rotational relaxation at ultralow energies*, Phys. Rev. A, **73**, 022703, (2006)
40. E. Bodo and F. A. Gianturco, *Ultra-low energy behavior of an ionic replacement reaction $^4\text{He}_2^+ + ^3\text{He} \rightarrow ^3\text{He}^4\text{He}^+ + ^4\text{He}$* , Phys. Rev. A, **73**, 032702, (2006).
39. E. Bodo and F. A. Gianturco, *Vibrational quenching at ultralow energies: calculations of the $\text{Li}_2(^1\Sigma_g^+; \nu \gg 0) + \text{He}$ superelastic scattering cross sections*, Phys. Rev. A, **73**, 052715, (2006)
38. E. Bodo, F.A. Gianturco, *Collisional Quenching of molecular rovibrational energy by He buffer loading at ultralow energies* Int. Rev. Phys. Chem. **25**, 313, (2006).
37. L. Gonzalez-Sanchez, F. Marinetti, E. Bodo, F.A. Gianturco, *$\text{OH}^-(X^1\Sigma^+)$ Collisions with $^4\text{He}(1S)$ at vanishing energies: a quantum analysis of rotational quenching efficiency*, J. Phys. B, **39**, S1203, (2006).
36. F. Marinetti, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Ionic OH as dopant of helium droplets: ab initio potential energy surfaces for $\text{OH}^+(\beta^3\Sigma^-) \cdot ^4\text{He}$, $\text{OH}^-(^1\Sigma^-) \cdot ^4\text{He}$ and stable structures of their smaller clusters*, J. Theo. & Comput. Chem. **5**, 543 (2006).
35. C. Di Paola, E. Bodo and F.A. Gianturco, *Adaptive clustering of a quantum solvent: the LiH^+ impurity in bosonic helium from stochastic calculations*, Eur. Phys. J. D. **40**, 377 - 385, (2006).
-
34. E. Bodo, F.A. Gianturco, and E. Yurtsever, *The Weak Li_2 -He Interaction Revisited: a Combined Ab-Initio and Empirical Modelling*, J. Low. Temp. Phys., **138**, 259, (2005).
33. C. Sanz, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Energetics and Structure of the Bound States in a Lithium Complex: The LiH_2^+ Electronic Ground State* Chem. Phys., **314**, 135, (2005).
32. E. Bodo, F. Sebastianelli, F. A. Gianturco and I. Pino, *Microsolvation of LiH^+ in Helium Clusters: many-body effects and additivity models for the interaction forces*, J. Phys. Chem. A, **109**, 4252, (2005).
31. J. Sabin Del Valle, E. Bodo, and F.A. Gianturco, *Rotational cooling of molecular gases by positron impact at vanishing collision energies*, J. Phys. B, **38**, 2069, (2005).
30. C. Di Paola, F. Sebastianelli, E. Bodo, I. Baccarelli, F. A. Gianturco and M. Yurtsever, *Microsolvation of Li^+ in Small He Clusters. $\text{Li}^+ \text{He}_n$ Species from Classical and Quantum Calculations*; J. Chem. Theory and Comput., **1**, 1045, (2005).
29. E. Scifoni, E. Bodo, F.A. Gianturco, *Ionic Reactions in He nanodroplets: the LiHHe^+ complex and its possible energy pathways into products from ab-initio calculations*, J. Chem. Phys., **122**, 224312, (2005)
28. E. Bodo, F. A. Gianturco, E. Yurtsever, M. Yurtsever, *Neutral and ionic dopants in helium clusters: interaction forces for the $\text{Li}_2(a^3\Sigma_u^+) \text{He}$ and $\text{Li}^+(X^2\Sigma_g^+) \text{He}$ complexes*, Mol. Phys., **103**, 3223, (2005).
-
27. S. Telega, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Rotationally inelastic collision of electrons with H_2 and N_2 molecules: converged space-frame calculations at low energies*, Eur. Phys. J. D, **29**, 357, (2004).
26. E. Bodo F. A. Gianturco F. Sebastianelli E. Yurtsever M. Yurtsever, *Rotational cooling of $\text{Li}_2(^1\Sigma_g^+)$ molecules by ultracold collisions with an He gas buffer*, Theor. Chem. Acc., **112**, 263, (2005).

25. E. Bodo F. A. Gianturco F. Sebastianelli E. Yurtsever M. Yurtsever, *Ab initio quantum dynamics with very weak Van der Waals interactions: structure and stability of small $Li_2(^1\Sigma_g^+) - ^4He$ clusters*, J. Chem. Phys., **120**, 9160, (2004).
24. E. Bodo and F. A. Gianturco, *Features of chemical reactions at vanishing kinetic energy: the presence of internally hot reagents*, Eur. Phys. J. D, **31**, 423, (2004)
23. E. Bodo, F. A. Gianturco, N. Balakrishnan and A. Dalgarno, *Chemical reactions in the limit of zero kinetic energy: virtual states and Ramsauer minima in $F + H_2 \rightarrow HF + H$* , J. Phys. B, **37**, 1, (2004).
22. E. Scifoni, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Charged cores in ionized 4He clusters III: a quantum model for the collisional relaxation dynamics*, Eur. Phys. J. D, **30**, 363, (2004)

21. R. Martinazzo, E. Bodo, and F. A. Gianturco, *A modified Variable-Phase algorithm for multichannel scattering with long-range potentials*, Comp. Phys. Comm., **151**, 187, (2003)
20. R. Martinazzo, E. Bodo, F. A. Gianturco and M. Raimondi, *Three-dimensional reactive surfaces for the LiH_2^+ system: an analysis of accurate ab-initio results*, Chem. Phys., **287**, 335, (2003).
19. E. Bodo, F. A. Gianturco, and R. Martinazzo, *The gas-phase lithium chemistry in the early universe: elementary processes, interaction forces and quantum dynamics*, Phys. Rep., **384**, 85, (2003).
18. R. Martinazzo, G. F. Tantardini, E. Bodo and F. A. Gianturco, *Accurate potential energy surfaces for the study of lithium-hydrogen ionic reactions*, J. Chem. Phys. , **119**, 11241, (2003).
17. E. Bodo, F. A. Gianturco, *Collisional Cooling of Polar Diatomics in 3He and 4He Buffer Gas: A Quantum Calculation at Ultralow Energies*, J. Phys. Chem. A., **107**, 7328, (2003).

16. E. Bodo, F. A. Gianturco, and A. Dalgarno, *Quenching of vibrationally excited $CO(\nu = 2)$ molecules by ultra-cold collisions with 4He atoms*, Chem. Phys. Lett., **353**, 1, (2002).
15. E. Bodo, A. Dalgarno, and F. A. Gianturco, *$F+D_2$ reaction at ultra-low temperatures*, J. Chem. Phys., **116**, 9222, (2002).
14. C. Cecchi-pestellini, E. Bodo, N. Balakrishnan, and A. Dalgarno. *Rotational and vibrational excitation of CO molecules by collisions with He atoms*. ApJ, **571**, 1015, (2002),
13. E. Bodo, A. Dalgarno, and F. A. Gianturco. *$F+D_2$ reaction at ultra-low temperatures, the effect of rotational excitation*, J. Phys. B, **35**, 2391, (2002).
12. M. Satta, E. Bodo, R. Martinazzo and F.A. Gianturco, *Photoexcitation of LiH_2^+ from selected initial states: a time-dependent model*, J. Chem. Phys., **117**, 177, (2002).
11. E. Bodo, E. Scifoni, F. Sebastianelli, F.A. Gianturco, and A. Dalgarno, *Rotational quenching in ionic systems at ultra-cold temperatures*, Phys. Rev. Lett., **89**, (2002).

10. E. Bodo, F. A. Gianturco, R. Martinazzo, and M. Raimondi, *Computed orientational anisotropy and vibrational couplings for the LiH-H interaction potential*, Eur. Phys. J. D, **15**, 321, (2001).
9. E. Bodo, F. A. Gianturco, R. Martinazzo, and M. Raimondi, *Possible reaction paths in the LiH_2^+ chemistry: a computational analysis of the interaction forces*, Chem. Phys., **271**, 309, (2001).
8. E. Bodo, F. A. Gianturco, and R. Martinazzo, *Reactive behavior of the LiH_2^+ system I: Evaluation of the lower lying potentials for the collinear geometries*, J. Phys. Chem. A, **105**, 10986, (2001).
7. E. Bodo, F. A. Gianturco, and R. Martinazzo, *Reactive behavior of the LiH_2^+ system II: Collision induced dissociation and collinear reaction dynamics of $LiH^+ + H$ from quantum time dependent calculations*, J. Phys. Chem. A, **105**, 10994, (2001).
6. R. Martinazzo, A. Famulari, M. Raimondi, E. Bodo, and F.A. Gianturco, *A multireference valence bond approach to electronic excited states*, J. Chem. Phys., **115**, 2917, (2001).

5. E. Bodo, F. A. Gianturco, R. Martinazzo, A. Forni, A. Famulari, and M. Raimondi, *Spatial energetics of protonated LiH: Lower-lying potential energy surfaces from valence bond calculations*, J. Phys. Chem. A, **104**, 11972, (2000).
4. E. Bodo, F. A. Gianturco, R. Martinazzo, F. Paesani, and M. Raimondi, *Testing van der waals interactions with quantum dynamics: repulsive anisotropy and well depth in LiH-He system*, J. Chem. Phys., **113**, 11071, (2000).
3. E. Bodo, F. A. Gianturco, F. Paesani, *Testing intermolecular potentials with scattering experiments: He-CO rotationally inelastic scattering*, Zeit. Phys. Chem, **214**, 1013, (2000).

2. E. Bodo, E. Buonomo, F.A. Gianturco, S. Kumar, A. Famulari, M. Raimondi, and M. Sironi, *Interaction anisotropy and quantum dynamics for vibrationally inelastic collision of $LiH(^1\Sigma^+)$ with $He(^1S)$* , Chem. Phys., **237**, 315, (1998).
1. E. Bodo, S. Kumar, F. A. Gianturco, A. Famulari, M. Raimondi, and M. Sironi, *Vibrational heating efficiency of $LiH(^1\Sigma^+)$ molecules in collision with $He(^1S)$ atoms*, J. Phys. Chem. A, **102**, 9390, (1998).

Books Chapters

1. A. Mariani, L. Engelbrecht, A. Le Donne, F. Mocci, E. Bodo and S. Passerini *Disclosing the hierarchical structure of ionic liquid mixtures by multiscale computational methods* in *Theoretical and Computational Approaches to Predicting Ionic Liquid Properties*, A. Joseph and S. Mathew eds., Elsevier, Amsterdam, Netherlands, (2021)
2. S. Mangialardo, L. Baldassarre, E. Bodo, and P. Postorino, *Raman Spectroscopy in Ionic Liquids Under Variable Thermodynamic and Environmental Conditions*. in *The Structure of Ionic Liquids* R. Caminiti and L. Gontrani (Eds), Soft and Biological Matter, Elsevier, Amsterdam, Netherlands, (2013) .
3. E. Bodo and V. Migliorati *Theoretical Description of Ionic Liquids* in *The Structure of Ionic Liquids* R. Caminiti and L. Gontrani eds., Soft and Biological Matter, Elsevier, Amsterdam, Netherlands, (2013)
4. E. Bodo and V. Migliorati (2011). *Theoretical Description of Ionic Liquids* in *Ionic Liquids - Classes and Properties*, Scott T. Handy eds., InTech, (2011)
5. E. Coccia, E. Bodo, F. Marinetti and F.A. Gianturco E. Yurtsever, M. Yurtsever, E. Yildirim, *Quantum structuring of ^4He Atoms around Ionic Dopants: energetics of Li^+ , Na^+ and K^+ from Stochastic Calculations*. in *Latest Advances in Atomic Cluster Collisions: Structure and Dynamics from the Nuclear to the Biological Scale*, Imperial College Press.

