

Daniele Padula

Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e Farmacia – Università di Siena

Via Aldo Moro 2, 53100, Siena, Italy

☎ +39 0577 23 2562 • ✉ daniele.padula@unisi.it

🌐 docenti.unisi.it/it/padula

Informazioni Personali

- Data di nascita: 01 Marzo 1985.
- Luogo di nascita: Pisa, Italia.
- Genere: Maschile.
- Cittadinanza: Italiana.

Conoscenze Linguistiche

- Italiano: madrelingua.
- Inglese: avanzato.
- Spagnolo: avanzato.

Formazione

- **Università di Pisa** **Pisa**
Ph.D., Scienze Chimiche *Gennaio 2010–Gennaio 2013*
Tesi: "Structure and Properties of Simple and Aggregate Systems by Circular Dichroism Spectroscopy".
- **ICCOM–CNR** **Pisa**
Internato di Ph.D. *Febbraio 2011–Dicembre 2012*
- **Università di Pisa** **Pisa**
Laurea Magistrale, Chimica Organica *Settembre 2007–Settembre 2009*
- **Scuola Normale Superiore** **Pisa**
Diploma, Chimica *Ottobre 2007–Settembre 2009*
- **Università della Basilicata** **Potenza**
Laurea Triennale, Chimica *Settembre 2003–Giugno 2007*

Esperienze Lavorative e di Ricerca

- **Professore Associato** **Siena, IT**
Università di Siena *Febbraio 2024–*
SSD CHEM–05/A, GSD 03/CHEM–05.
- **RTD–B** **Siena, IT**
Università di Siena *Febbraio 2021–Gennaio 2024*
Progetto "Rita Levi Montalcini" su "Designing New Organic Molecules for Energy Applications with Stochastic Optimisation and Machine Learning".
- **RTD–A** **Siena, IT**
Università di Siena *Gennaio 2020–Gennaio 2021*
Progetto su "Sviluppo, valutazione ed applicazione di software per lo studio della spettroscopia e fotoreattività di cromofori incorporati in cavità proteiche".

- **Research Scientist** **Dübendorf, CH**
Laboratory for Functional Polymers, EMPA *Marzo 2019–Dicembre 2019*
 Progetto sull'identificazione computazionale di nuovi coloranti polimetinici con assorbimento nel vicino infrarosso.
- **Postdoctoral Research Associate** **Liverpool, UK**
University of Liverpool *Agosto 2017–Febbraio 2019*
 Partecipazione al progetto di ricerca europeo ESTYMA finanziato dall'ERC nell'ambito dello studio del trasporto di energia in complessi fotosintetici e materiali organici attraverso tecniche computazionali, spettroscopiche, e di data science.
- **Postdoctoral Research Associate** **Coventry, UK**
University of Warwick *Aprile 2016–Luglio 2017*
 Partecipazione al progetto di ricerca europeo ESTYMA finanziato dall'ERC nell'ambito dello studio del trasporto di energia in complessi fotosintetici e materiali organici attraverso tecniche computazionali, spettroscopiche, e di data science.
- **Assegnista di Ricerca** **Pisa, IT**
Università di Pisa *Aprile 2015–Marzo 2016*
 Partecipazione al progetto di ricerca europeo EnLight finanziato dall'ERC nell'ambito dello studio dell'effetto dell'ambiente sulla risposta ottica di biopolimeri attraverso tecniche computazionali, spettroscopiche, e statistiche.
- **Postdoctoral Fellow** **Praga, CZ**
Institute of Organic Chemistry and Biochemistry *Marzo 2013–Marzo 2015*
 Borsa di postdottorato per un progetto nell'ambito dello studio della risposta ottica di complessi metallo-cromoforo presenti in biopolimeri attraverso tecniche computazionali e spettroscopiche.

Finanziamenti e Borse di Studio

- **F-NF Grant** **Siena, IT**
Università di Siena *Dicembre 2024–Novembre 2026*
 PI del progetto: "Coarse-graining the chiral aggregation of conjugated polymers". 20K€.
- **Centro Nazionale HPC, Big Data, Quantum Computing Open**
IOM-CNR *Ottobre 2024–Novembre 2025*
 Co-PI del progetto: "Rethinking Organic Materials: from Design to Efficient Optoelectronics". ≈290K€.
- **PRIN**
Ministero dell'Università e della Ricerca *Ottobre 2023–Settembre 2025*
 PI del progetto "Enhancing Circularly Polarised Emitters Quantum Efficiency Exploiting Singlet-Triplet Inversion", ≈235K€.
- **F-Cur Grant** **Siena, IT**
Università di Siena *Febbraio 2022–Giugno 2023*
 PI del progetto "Triplet Transport in Thermally Activated Delayed Fluorescent Aggregates", ≈25K€.
- **Grant "Rita Levi Montalcini"**
Ministero dell'Università e della Ricerca *Febbraio 2021–Gennaio 2024*
 PI del progetto "Designing New Organic Molecules for Energy Applications with Stochastic Optimisation and Machine Learning", ≈260K€.
- **Grant ISCRA C** **Bologna, IT**
CINECA
 PI di 4 progetti ISCRA C, ≈100K CPU hours ciascuno.

- **Institute of Organic Chemistry and Biochemistry** **Praga**
IOCB Postdoctoral Fellowship *Marzo 2013–Marzo 2015*
- **Università di Pisa** **Pisa**
Borsa di Dottorato della Scuola di Dottorato “G. Galiei” *Gennaio 2010–Gennaio 2013*
- **Scuola Normale Superiore** **Pisa**
Borsa di studente di corso ordinario *Ottobre 2007–Settembre 2009*

Altri Titoli

- **Computing π -Conjugated Compounds Society**
Membro del Comitato Scientifico *Febbraio 2025–*
- **15th Symposium on Computing π -Conjugated Compounds** **Siena, Italy**
Co-organizzatore *Febbraio 2025*
- **Abilitazione Scientifica Nazionale (Professore Ordinario)** **Italia**
Classe 03/C1
 - *Classe 03/C1: Chimica Organica (Marzo 2025–Marzo 2037)*
- **Abilitazione Scientifica Nazionale (Professore Associato)** **Italia**
Classi 03/C1, 03/B2, 03/A2
 - *Classe 03/A2: Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche (Gennaio 2022–Gennaio 2031)*
 - *Classe 03/B2: Fondamenti Chimici delle Tecnologie (Aprile 2021–Aprile 2030)*
 - *Classe 03/C1: Chimica Organica (Luglio 2020–Luglio 2029)*
- **Habilitation à Maître de Conférences (Professore Associato)** **Francia**
Classi 31 e 32 *Febbraio 2018–Febbraio 2022*
 - *Classe 31: Chimica Teorica, Chimica Fisica e Chimica Analitica.*
 - *Classe 32: Chimica Organica, Chimica Industriale e Chimica Minerale.*
- **Editor**
Theoretical Chemistry Accounts, Springer *Marzo 2025–*
Membro del Comitato Editoriale del giornale *TCA* pubblicato da Springer.
- **Associate Editor**
Science and Technology of Advanced Materials: Methods, Taylor&Francis *Gennaio 2021–*
Giornale open access STAM: Methods, pubblicato dalla casa editrice Taylor&Francis.
- **Subject Editor**
Science and Technology of Advanced Materials, Taylor&Francis *Gennaio 2020–Marzo 2024*
Argomento: Materials Informatics, per il giornale open access STAM pubblicato dalla casa editrice Taylor&Francis.
- **Topic Editor**
Molecules, MDPI *Settembre 2020–*
Topic Editor per il giornale open access Molecules pubblicato dalla casa editrice MDPI.
- **Reviewer**
ACS, Elsevier, Wiley, MDPI, Agenzie di Finanziamento

- ACS: *J. Am. Chem. Soc.*, *Acc. Chem. Res.*, *J. Chem. Theory Comput.*, *J. Phys. Chem.*, *J. Chem. Inf. Model.*, *ACS Omega*
- Wiley: *Adv. Funct. Mater.*, *ChemPhotoChem*, *Energy Technol.*, *Chirality*
- Elsevier: *Org. Electron.*, *Sol. Energy*, *J. Mol. Struct.*, *Artificial Intelligence Chemistry*
- MDPI: *Energies*, *Molecules*
- ERC Starting Grant, ADMIRE COFUND MSCA Postdoctoral Fellowship

Esperienze di Insegnamento

- **Introduction to Chiroptical Spectroscopy** Siena, IT
Università di Siena Luglio 2021
 Corso di 12 ore (1.5 CFU) in inglese per la Scuola di Dottorato in Chemical and Pharmaceutical Sciences ([Syllabus](#)).
- **Applied Computational Chemistry** Siena, IT
Università di Siena
 Corso di 32 ore su Simulazioni di Processi Fotofisici per il quarto anno del Corso di Laurea Magistrale in Chemistry.
 - Aprile 2027–Giugno 2027 ([Syllabus](#) e [Materiale](#)).
 - Aprile 2026–Giugno 2026 ([Syllabus](#) e [Materiale](#)).
- **Quantum Chemistry Applied to Thermal and Photochemical Reactions** Siena, IT
Università di Siena
 Corso di 32 ore (3 CFU) in inglese sullo studio computazionale della reattività di stato fondamentale ed eccitato di molecole organiche per i Corsi di Laurea Triennale in Chimica e Magistrale in Chemistry.
 - Aprile 2025–Maggio 2025 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
 - March 2024–May 2024 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
 - Marzo 2023–Maggio 2023 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
 - Marzo 2022–Maggio 2022 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- **Laboratorio di Analisi Organica** Siena, IT
Università di Siena
 Corso di 24 ore di lezione frontale + 48 ore i Laboratorio (6 CFU) sulla caratterizzazione e identificazione spettroscopica di composti organici per il terzo anno del Corso di Laurea Triennale in Chimica.
 - Ottobre 2026–Novembre 2026 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
 - Ottobre 2023–Novembre 2023 ([Syllabus](#), solo Lab).
 - Ottobre 2022–Novembre 2022 ([Syllabus](#), solo Lab).
 - Novembre 2021–Gennaio 2022 ([Syllabus](#), solo Lab).
- **Laboratorio di Chimica Organica** Siena, IT
Università di Siena
 Corso di 48 ore (6 CFU) su tecniche base di laboratorio di chimica organica per il secondo anno del Corso di Laurea Triennale in Chimica.
 - Marzo 2021–Aprile 2021 ([Syllabus](#)).
 - Marzo 2020–Aprile 2020 ([Syllabus](#)).
- **Chimica dei Composti Eterociclici** Siena, IT
Università di Siena
 Corso di 48 ore (6 CFU) su proprietà e reattività di composti eterociclici per il secondo anno del Corso di Laurea in Farmacia.
 - Marzo 2025–Giugno 2025 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
 - Marzo 2024–Giugno 2024 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).

- **Chimica Organica**
 - *Università di Siena*

Corso di 48 ore (6 CFU) su Chimica Organica di baseal primo anno del Corso di Laurea in Biotecnologie.

 - Dicembre 2026 (presso il [Siena College of Future Biotechnology, Università di Nantong, Cina](#), in Inglese).
 - Ottobre 2026–Dicembre 2026 ([Syllabus](#)).
 - Marzo 2026–Giugno 2026 ([Syllabus](#), in Inglese).
 - Novembre 2025–Gennaio 2026 ([Syllabus](#)).
 - Novembre 2024–Gennaio 2025 ([Syllabus](#)).
- **Supervisione di Postdoc**
 - Marco Campetella (Università di Siena, Dicembre 2024–Novembre 2025)
 - Stefano Vaghi (Università di Siena, Dicembre 2024–Novembre 2025)
- **Supervisione di progetti di PhD**
 - Simone Veglianti (Università di Siena, Novembre 2024–Ottobre 2027)
- **Supervisione di 3 progetti di Laurea Magistrale, 7 progetti di Laurea Triennale, e 4 progetti brevi**

Parametri Bibliometrici

- **Scopus:** 74 articoli, ≈ 2100 citazioni, h -index = 25 (Luglio 2026, [ID 24463809800](#)).
- **Google Scholar:** ≈ 2600 citazioni, h -index = 29 (Luglio 2025, [link al profilo](#)).

Collaborazioni Internazionali

- **Prof. Alessandro Troisi** (University of Liverpool, UK): identificazione computazionale di materiali organici per applicazioni nel campo dell'energia (celle fotovoltaiche, OLED).
- **Prof. Frank Nüesch, Dr. Roland Hany** (Empa, Dübendorf, Svizzera): dinamica delle trappole in OLED.
- **Prof. Marco Fusè** (Università di Brescia, Italy) and **Prof. Cristiano Zonta** (Università di Padova, Italy): sviluppo di emettitori e fotocatalizzatori con inversione singoletto–tripletto.
- **Dr. Giacomo Prampolini** (ICCOM–CNR, Pisa, Italia): parametrizzazione MM di cromofori basata su dati QM, effetto di catene alchiliche su proprietà strutturali ed elettroniche di semiconduttori organici, transizioni di fase in cristalli liquidi.
- **Dr. Alessandro Landi** (Università di Salerno, Italia): trasporto di carica ed eccitoni in celle fotovoltaiche, OLED, e transistor a base di materiali organici.

Referenze

- **Prof. Alessandro Troisi**
Dept. of Chemistry
University of Liverpool
Crown St
L69 7ZD, Liverpool, UK
✉ a.troisi@liverpool.ac.uk
☎ +44 (0)151 795 7345
- **Prof. Frank Nüesch**
Laboratory for Functional Polymers
Swiss Federal Laboratories for Materials
Science and Technology
Überlandstrasse 129
8600, Dübendorf, Switzerland
✉ frank.nuesch@empa.ch
☎ +41 (0)58 765 4740
- **Prof. Massimo Olivucci**
Dipartimento di Biotecnologie, Chimica e
Farmacia
Università di Siena
via A. Moro 2
53100, Siena, Italy
✉ massimo.olivucci@unisi.it
☎ +39 0577 23474
- **Dr. Fabrizio Santoro**
ICCOM–CNR
via G. Moruzzi 1
56124, Pisa, Italy
✉ fabrizio.santoro@iccom.cnr.it
☎ +39 050 315 2458
- **Prof. Benedetta Mennucci**
Dipartimento di Chimica e Chimica Indu-
striale
Università di Pisa
via G. Moruzzi 13
56124, Pisa, Italy
✉ benedetta.mennucci@unipi.it
☎ +39 050 2219 293
- **Prof. Gennaro Pescitelli**
Dipartimento di Chimica e Chimica Indu-
striale
Università di Pisa
via G. Moruzzi 13
56124, Pisa, Italy
✉ gennaro.pescitelli@unipi.it
☎ +39 050 2219 339