

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 • dpadula85 • 0000-0002-7171-7928

Scholar • Scopus 24463809800

Ultimo aggiornamento: 20 Ago 2026

Informazioni Personali

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

Conoscenze Linguistiche

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

Formazione

- **Università di Pisa** **Pisa, IT**
Ph.D., Scienze Chimiche *Gen 2010–Gen 2013*
Tesi: *Structure and Properties of Simple and Aggregate Systems by Circular Dichroism Spectroscopy.*
- **ICCOM–CNR** **Pisa, IT**
Internato di Ph.D. *Feb 2011–Dic 2012*
- **Università di Pisa** **Pisa, IT**
Laurea Magistrale, Chimica Organica *Set 2007–Set 2009*
- **Scuola Normale Superiore** **Pisa, IT**
Diploma, Chimica *Ott 2007–Set 2009*
- **Università della Basilicata** **Potenza, IT**
Laurea Triennale, Chimica *Set 2003–Giu 2007*

Esperienze Lavorative e di Ricerca

- **Professore Associato** **Siena, IT**
Università di Siena *Feb 2024–*
SSD CHEM–05/A, GSD 03/CHEM–05.
- **RTD–B** **Siena, IT**
Università di Siena *Feb 2021–Gen 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 *Gen 2020–Gen 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 *Mar 2019–Dic 2019*
 Progetto sull'identificazione computazionale di nuovi coloranti polimetinici con assorbimento nel vicino infrarosso.
- **Postdoctoral Research Associate** **Liverpool, U.K.**
Prof. Alessandro Troisi's group, University of Liverpool *Ago 2017–Feb 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, U.K.**
Prof. Alessandro Troisi's group, University of Warwick *Apr 2016–Lug 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.
- **Postdoctoral Researcher** **Pisa, IT**
Prof. Benedetta Mennucci's group, Università di Pisa *Apr 2015–Mar 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** **Prague, CZ**
Computational Spectroscopy group, IOCB *Mar 2013–Mar 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

Finanziamento competitivo totale > 800K € e > 400K ore GPU/CPU come PI/Co-PI.

- **F-NF Grant** **Siena, IT**
Università di Siena *Dic 2024–Nov 2026*
 PI del progetto: "Coarse-graining the chiral aggregation of conjugated polymers". 20K€.
- **Centro Nazionale HPC, Big Data, Quantum Computing Open**
IOM–CNR *Ott 2024–Nov 2025*
 Co-PI del progetto: "Rethinking Organic Materials: from Design to Efficient Optoelectronics". ≈290K€.
- **PRIN Grant**
Italian Ministry of University and Research *Ott 2023–Set 2025*
 PI del progetto "Enhancing Circularly Polarised Emitters Quantum Efficiency Exploiting Singlet-Triplet Inversion", ≈235K€.
- **F-Cur Grant** **Siena, IT**
Università di Siena *Feb 2022–Giu 2023*
 PI del progetto "Triplet Transport in Thermally Activated Delayed Fluorescent Aggregates", ≈25K€.
- **Grant "Rita Levi Montalcini"**
Ministero dell'Università e della Ricerca *Feb 2021–Gen 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.

- **IOCB Postdoctoral Fellowship** **Prague, CZ**
Institute of Organic Chemistry and Biochemistry *Mar 2013–Mar 2015*
- **Graduate School “G. Galilei” Ph.D. Fellowship** **Pisa, IT**
Università di Pisa *Gen 2010–Dic 2012*
- **Scuola Normale Undergraduate Fellowship** **Pisa, IT**
Scuola Normale Superiore *Ott 2007–Set 2009*

Altri Titoli

- **Computing π -Conjugated Compounds Society**
Membro del Comitato Scientifico *Feb 2025–*
- **15th Symposium on Computing π -Conjugated Compounds** **Siena, Italy**
Co-organizzatore *Feb 2025*
- **Abilitazione Scientifica Nazionale (Professore Ordinario)** **Italy**
Class 03/C1
- *Classe 03/C1: Chimica Organica (Mar 2025–Mar 2037)*
- **Abilitazione Scientifica Nazionale (Professore Associato)** **Italy**
Class 03/C1, 03/B2, 03/A2
- *Classe 03/A2: Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche (Gen 2022–Gen 2031)*
- *Classe 03/B2: Fondamenti Chimici delle Tecnologie (Apr 2021–Apr 2030)*
- *Classe 03/C1: Chimica Organica (Lug 2020–Lug 2029)*
- **Habilitation à Maître de Conférences (Associate Professor)** **Francia**
Class 31 and 32 *Feb 2018–Feb 2022*
- *Classe 31: Chimica Teorica, Chimica Fisica e Chimica Analitica.*
- *Classe 32: Chimica Organica, Chimica Industriale e Chimica Minerale.*
- **Editor**
Theoretical Chemistry Accounts, Springer *Mar 2025–*
Membro del Comitato Editoriale del giornale *TCA* pubblicato da Springer.
- **Associate Editor** *Gen 2021–*
Science and Technology of Advanced Materials: Methods, Taylor&Francis
Giornale open access *STAM: Methods*, pubblicato dalla casa editrice Taylor&Francis.
- **Subject Editor** *Gen 2020–Mar 2024*
Science and Technology of Advanced Materials, Taylor&Francis
Argomento: Materials Informatics, per il giornale open access *STAM* pubblicato dalla casa editrice Taylor&Francis.
- **Topic Editor** *Set 2020–*
Molecules, MDPI
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 Lug 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.
- Apr 2027–Giu 2027 ([Syllabus](#) e [Materiale](#)).
- Apr 2026–Giu 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.
- Apr 2025–Mag 2025 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- Mar 2024–Mag 2024 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- Mar 2023–Mag 2023 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- Mar 2022–Mag 2022 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- **Organic Analysis Laboratory** Siena, IT
Università di Siena
Corso di 24 ore di lezione frontale + 48 ore di Laboratorio (6 CFU) sulla caratterizzazione e identificazione spettroscopica di composti organici per il terzo anno del Corso di Laurea Triennale in Chimica.
- Ott 2026–Nov 2026 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- Ott 2023–Nov 2023 ([Syllabus](#), solo Lab).
- Ott 2022–Nov 2022 ([Syllabus](#), solo Lab).
- Nov 2021–Gen 2022 ([Syllabus](#), solo Lab).
- **Chemistry of Heterocyclic Compounds** 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.
- Mar 2026–Giu 2026 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- Mar 2025–Giu 2025 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- Mar 2024–Giu 2024 ([Syllabus](#) e [Materiale didattico](#)).
- **Organic Chemistry Laboratory** 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.
- Mar 2021–Apr 2021 ([Syllabus](#)).
- Mar 2020–Apr 2020 ([Syllabus](#)).
- **Organic Chemistry** Siena, IT
Università di Siena
Corso di 48 ore (6 CFU) su Chimica Organica di base al primo anno del Corso di Laurea in Biotecnologie.
- Dic 2026 (presso il [Siena College of Future Biotechnology, Università di Nantong, Cina](#), in Inglese).
- Ott 2026–Dic 2026 ([Syllabus](#)).
- Mar 2026–Giu 2026 ([Syllabus](#), in Inglese).
- Nov 2025–Gen 2026 ([Syllabus](#)).
- Nov 2024–Gen 2025 ([Syllabus](#)).

- **Supervisione di Postdoc**
 - Marco Campetella (Università di Siena, Dic 2024–Nov 2025)
 - Stefano Vaghi (Università di Siena, Dic 2024–Nov 2025)
- **Supervisione di progetti di PhD**
 - Simone Veglianti (Università di Siena, Nov 2024–Ott 2027)
- **Supervisione di 3 progetti di Laurea Magistrale, 7 progetti di Laurea Triennale, e 4 progetti brevi**

Parametri Bibliometrici

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

Collaborazioni Internazionali

- **Prof. Alessandro Troisi** (University of Liverpool, UK): screening ad alto rendimento di materiali organici per applicazioni energetiche (fotovoltaico organico, singlet fission, emettitori).
- **Prof. Frank Nüesch, Dr. Roland Hany** (Empa, Dübendorf, Switzerland): dinamica delle trappole elettroniche in OLED.
- **Prof. Marco Fusè** (Università di Brescia, Italy) and **Prof. Cristiano Zonta** (Università di Padova, Italy): sviluppo di emettitori chirali e fotocatalizzatori con inversione singoletto–tripletto.
- **Dr. Giacomo Prampolini** (ICCOM–CNR, Pisa, Italy): effetto di catene alchiliche sulle proprietà elettroniche di semiconduttori organici, proprietà strutturali di aggregati tramite MD.
- **Dr. Alessandro Landi** (Università di Salerno, Italy): trasporto di carica ed eccitoni in celle fotovoltaiche organiche, diodi ad emissione di luce, e transistor a effetto di campo 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. Gennaro Pescitelli**
Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale
Università di Pisa
via G. Moruzzi 13
56124, Pisa, Italy
✉ gennaro.pescitelli@unipi.it
☎ +39 050 2219 339
- **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
- **Prof. Benedetta Mennucci**
Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale
Università di Pisa
via G. Moruzzi 13
56124, Pisa, Italy
✉ benedetta.mennucci@unipi.it
☎ +39 050 2219 293
- **Dr. Fabrizio Santoro**
ICCOM–CNR
via G. Moruzzi 1
56124, Pisa, Italy
✉ fabrizio.santoro@iccom.cnr.it
☎ +39 050 315 2458
- **Prof. Frank Nüesch**
Laboratory for Functional Polymers
Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology
Überlandstrasse 129
8600, Dübendorf, Switzerland
✉ frank.nueesch@empa.ch
☎ +41 (0)58 765 4740