

Stefano Valdo Meille - curriculum vitae

Stefano V. Meille è dal 2000 professore ordinario di Chimica e membro dl Collegio docenti del Dottorato in Ingegneria dei Materiali al Politecnico di Milano. Si è laureato in Chimica nel 1976, (Università degli Studi di Milano), 110 e lode, tesi in Chimica Inorganica con Alfredo Musco. Ha quindi lavorato al Politecnico di Milano con Giuseppe Allegra, e quindi, dal 1978 al 1981, alla Case Western Reserve University di Cleveland, Ohio, U.S.A con P. Geil e all'Istituto "Giuliana Ronzoni" di Milano con B. Casu. Ricercatore dal 1981 al 1998 presso il Dipartimento di Chimica del Politecnico di Milano, nel gruppo di Giuseppe Allegra. EMBO (European Molecular Biology Organization) fellowship nel 1982 con E.D.T. Atkins e A. Keller all'Università di Bristol (U.K.). Nel 1990/91 "NATO Advanced Fellowship" presso la Case Western Reserve University di Cleveland. Nel 1991 ha condiviso con Sergio Brückner il premio Federchimica, per la determinazione della struttura della forma γ e lo studio del polimorfismo del polipropilene isotattico. Docente di Chimica all'Università di Bergamo dal 1993 al 1998, quindi professore associato di Chimica al Politecnico di Milano dal 1998 al 2000.

E' stato invitato a tenere seminari e lezioni in primarie istituzioni di ricerca, in convegni e scuole nazionali ed internazionali.

E' membro dell'American Chemical Society, e dal 2006 della IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), ove partecipa ai lavori della commissione sulla terminologia di polimeri. Dall'ottobre 2010 è stato eletto membro corrispondente dell'Istituto Lombardo - Accademia di Scienze e Lettere. Dal 2018 è membro dell'editorial board della rivista "Polymers".

Esercita attività di referee per riviste internazionali, tra le quali: *Journal of the American Chemical Society*, *Macromolecules*, *Macromolecular Chemistry and Physics*, *Macromolecular Rapid Commun.*, *Journal of Physical Chemistry*, *European Polymer Journal*, *Synthetic Metals*, *Acta Crystallographica*, *Soft Matter*, etc. E' stato inoltre referee di progetti per la National Science Foundation (NSF) americana.

L'attività scientifica di S. V. Meille, documentata da oltre 170 pubblicazioni su riviste internazionali (*h-index*: 40 (Scopus, Researcher ID H-7435-2013), si è svolta prevalentemente presso il Dipartimento CMIC del Politecnico di Milano e presso l'ISMAR-CNR di Milano, ove per anni ha tenuto un incarico di ricerca. Riguarda prevalentemente l'indagine della struttura, della conformazione molecolare e della morfologia, di polimeri sintetici, ma anche di altri sistemi molecolari, principalmente organici o biologici, con tecniche di diffrazione e scattering, di microscopia e di spettroscopia. Lo scopo è definire modelli strutturali di materiali, per scale che vanno dalla frazione di nanometro a quella macroscopica; l'individuazione dei fattori determinanti l'organizzazione strutturale, oltre che nelle caratteristiche molecolari, nelle specificità dei processi di formativi o di lavorazione, e la determinazione di correlazioni tra struttura alle varie scale, e proprietà. Oltre ad un interesse per nuove tecniche e metodologie di determinazione strutturale, particolare attenzione viene dedicata anche allo studio di mesofasi e di sistemi con gradi di ordine parziale o disordinati, nella prospettiva di individuare il ruolo di tali stati nei processi di autoorganizzazione di materiali. Negli ultimi anni la ricerca è stata focalizzata su materiali organici semiconduttori e di interesse per applicazioni sensoristiche e nel fotovoltaico organico. I lavori più recenti riguardano la struttura e la dinamica molecolare di polimeri coniugati o ad alta rigidità conformazionale, e di molecole organiche (fullereni funzionalizzati, oligotiofeni) con applicazioni nei medesimi contesti.

Alcune pubblicazioni:

1. C.M. Fellows, K.H. Hellwich, S.V. Meille, G. Moad, T. Nakano, M. Vert "Definitions and notations relating to tactic polymers (IUPAC Recommendations 2020)", *Pure and Applied Chemistry*, **92**, 1769-1779, (2020).
2. M. Casalegno, T. Nicolini, A. Famulari, G. Raos, R. Po, S.V. Meille, "Atomistic modelling of entropy driven phase transitions between different crystal modifications in polymers: the case of poly (3-alkylthiophenes)" *Physical Chemistry Chemical Physics* **20**, 28984-28989 (2018).
3. H.-C. Yu, L. Li, J. Gao, J. Tong, W. Zheng, M. Cametti, A. Famulari, S. V. Meille, F. Guo and J. Martí-Rujas "Insights into the formation of chiral second sphere coordination complexes with aromatic tris amines: combined single crystal X-ray crystallography and molecular modeling analyses" *Dalton Trans.*, **44**, 15960-15965 (2015).

4. A. Cominetti, A. Pellegrino, L. Longo, R. Po, A. Tacca, C. Carbonera, M. Salvalaggio, M. Baldrighi, S.V. Meille, "Polymer solar cells based on poly(3-hexylthiophene) and fullerene: Pyrene acceptor systems", *Mater. Chem. and Phys.*, **159**, 46-55 (2015).
5. J. Idé, D. Fazzi, M. Casalegno, S.V. Meille, G. Raos, : "Electron transport in crystalline PCBM-like fullerene derivatives: A comparative computational study" *Journal of Materials Chemistry C*, **2**, 7313–7325 (2014).
6. T. Nicolini, A. Famulari, T. Gatti, J. Martí-Rujas, F. Villafiorita-Monteleone, E. V. Canesi, F. Meinardi, C. Botta, E. Parisini, S. V. Meille, C. Bertarelli: "Structure–Photoluminescence Correlation for Two Crystalline Polymorphs of a Thiophene–Phenylene Co-Oligomer with Bulky Terminal Substituents", *J. Phys. Chem. Lett.*, **5**, 2171–2176 (2014)
7. M. Casalegno, S. Zanardi, F. Frigerio, R. Po, C. Carbonera, G. Marra, T. Nicolini, G. Raos, S.V. Meille: "Solvent-free phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PCBM) from clathrates: insights for organic photovoltaics from crystal structures and molecular dynamics"; *Chem. Commun.*, 2013, **49**, 4525-4527 (2013)
8. F. Frigerio, M. Casalegno, C. Carbonera, T. Nicolini, S.V. Meille and G. Raos: "Molecular dynamics simulations of the solvent- and thermal history-dependent structure of the PCBM fullerene derivative" *J. Mater. Chem.*, **22**, 5434-43 (2012)
9. A. Buono, A. Famulari, S. V. Meille, G. Ricci, L. Porri: "2,3-exo-Disyndiotactic Polynorbornene: A Crystalline Polymer with Tubular Helical Molecular Structure " *Macromolecules*, **44**, 3681-3684 (2011).
10. A. Buono, N.H.Son, G. Raos, L. Gila, A. Cominetti, M. Catellani, S. V. Meille: "Form II poly(3-butylthiophene): crystal structure and preferred orientation in spherulitic thin films " *Macromolecules*, **43**, 6772–6781 (2010).
11. M. Moreno, M. Casalegno, G. Raos, S. V. Meille and R. Po "Molecular modeling of crystalline alkylthiophene oligomers and polymers" *J. Phys. Chem., B*, **114**, 1591-1502 (2010)
12. P. Arosio, A. Famulari, M. Moreno, G. Raos M. Catellani, S. V. Meille: "Ordered stacking of regioregular head-to-tail polyalkylthiophenes: insights from the crystal structure of form I' poly(3-*n*-butylthiophene" *Chemistry of Materials*, **21**, 78-87 (2009)
13. G. Ricci, A. Boglia, A.C. Boccia, L. Zetta, A. Famulari, S. V. Meille: New Stereoregularity in the Stereospecific Polymerization of Bulky Strained Olefins: Diheterotactic Polynorbornene. *Macromolecules*, **41**, 3109-3113 (2008)
14. G. Allegra, S. V. Meille; Mesomorphic Phases of Flexible Polymers: the Self-Compacting Chain Model, *Macromolecules*, **37**, 3487-3496 (2004)

Stefano Valdo Meille has been full professor of Chemistry at the Politecnico di Milano (Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica “Giulio Natta”) since September 2000. He holds a “Laurea” Degree in Pure Chemistry at the University of Milano, *cum laude* (28. 10.1976). From 1977 to 1981 he was research fellow at the Institute of Chemistry of the Politecnico di Milano (Italy) with professor G. Allegra, at the Department of Macromolecular Science of Case Western Reserve University (Cleveland, Ohio, USA), with professors P. Geil and J. B. Lando, and at the Istituto di Chimica e Biochimica "G. Ronzoni", Milano (professor B. Casu). From 1981 he was assistant professor (ricercatore) at the Department of Chemistry of the Polytechnic of Milano; from 1993 to 1998 lecturer at the University of Bergamo, Italy; from 1998 to 2000 associated professor of Chemistry at the Politecnico di Milano.

International fellowships, awards etc.: EMBO fellowship with professor E.D.T. Atkins at the University of Bristol (1982); NATO Advanced Fellowship (1991) at the Department of Macromolecular Science of Case Western Reserve University (Cleveland, Ohio, USA); Italian Chemical Industry Association Award (Premio Federchimica) 1991 for research on polypropylene polymorphism. Invited speaker or lecturer in a number of international and national schools and conferences, universities, and research laboratories. Member of IUPAC, active in the Subcommittee on Polymer Terminology, member of the American Chemical Society and since October 2010 corresponding member of the Istituto Lombardo - Accademia di Scienze e Lettere.

Referee for several international journals: *Journal of the American Chemical Society, Macromolecules, Macromolecular Chemistry and Physics, Macromolecular Rapid Commun., Journal of Physical Chemistry, European Polymer Journal, Synthetic Metals, Acta Crystallographica, Soft Matter, Polymer, etc.*

Stefano V. Meille has published over 170 research papers on international refereed journals and currently has an *h*-index of 40 (Scopus, Researcher ID H-7435-2013). His research interests involve principally structural, morphological and modeling studies of synthetic polymers, but also of biopolymers, small organic molecules, organometallic and inorganic compounds, principally by diffraction techniques, but also by other scattering approaches, microscopies and various spectroscopies. New structure determination and refinement methods on one hand and the study of mesophases and semiordered or disordered systems have been also specifically focused, in a perspective of examining the role of such states in self-assembly, crystallization and other ordering processes and in the formation of nanocomposites. In recent years the research of S. V. Meille has been specifically aimed at structure-properties relationships of organic semiconducting materials for sensing and photovoltaic applications. The structure and the molecular dynamics of conjugated or conformationally rigid polymers were targeted along with similar fundamental properties of smaller organic molecules (functionalized fullerenes, oligothiophenes).

Some publication :

1. C.M. Fellows, K.H. Hellwich, S.V. Meille, G. Moad, T. Nakano, M. Vert “Definitions and notations relating to tactic polymers (IUPAC Recommendations 2020)”, *Pure and Applied Chemistry*, **92**, 1769-1779, (2020).
2. M. Casalegno, T. Nicolini, A. Famulari, G. Raos, R. Po, S.V. Meille, “ Atomistic modelling of entropy driven phase transitions between different crystal modifications in polymers: the case of poly (3-alkylthiophenes)” *Physical Chemistry Chemical Physics* **20**, 28984-28989 (2018).
3. H.-C. Yu, L. Li, J. Gao, J. Tong, W. Zheng, M. Cametti, A. Famulari, S. V. Meille, F. Guo and J. Martí-Rujas “Insights into the formation of chiral second sphere coordination complexes with aromatic tris amines: combined single crystal X-ray crystallography and molecular modeling analyses” *Dalton Trans.*, **44**, 15960–15965 (2015).
4. A. Cominetti, A. Pellegrino, L. Longo, R. Po, A. Tacca, C. Carbonera, M. Salvalaggio, M. Baldrighi, S.V. Meille, “Polymer solar cells based on poly(3-hexylthiophene) and fullerene: Pyrene acceptor systems”, *Mater. Chem. and Phys.*, **159**, 46-55 (2015).
5. J. Idé, D. Fazzi, M. Casalegno, S.V. Meille, G. Raos, : “Electron transport in crystalline PCBM-like fullerene derivatives: A comparative computational study” *Journal of Materials Chemistry C*, **2**, 7313–7325 (2014).

6. T. Nicolini, A. Famulari, T. Gatti, J. Martí-Rujas, F. Villafiorita-Monteleone, E. V. Canesi, F. Meinardi, C. Botta, E. Parisini, S. V. Meille, C. Bertarelli: "Structure-Photoluminescence Correlation for Two Crystalline Polymorphs of a Thiophene-Phenylene Co-Oligomer with Bulky Terminal Substituents", *J. Phys. Chem. Lett.*, **5**, 2171-2176 (2014)
7. M. Casalegno, S. Zanardi, F. Frigerio, R. Po, C. Carbonera, G. Marra, T. Nicolini, G. Raos, S. V. Meille: "Solvent-free phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PCBM) from clathrates: insights for organic photovoltaics from crystal structures and molecular dynamics"; *Chem. Commun.*, 2013, **49**, 4525-4527 (2013)
8. F. Frigerio, M. Casalegno, C. Carbonera, T. Nicolini, S. V. Meille and G. Raos: "Molecular dynamics simulations of the solvent- and thermal history-dependent structure of the PCBM fullerene derivative" *J. Mater. Chem.*, **22**, 5434-43 (2012)
9. A. Buono, A. Famulari, S. V. Meille, G. Ricci, L. Porri: "2,3-exo-Disyndiotactic Polynorbornene: A Crystalline Polymer with Tubular Helical Molecular Structure " *Macromolecules*, **44**, 3681-3684 (2011).
10. A. Buono, N.H.Son, G. Raos, L. Gila, A. Cominetti, M. Catellani, S. V. Meille: "Form II poly(3-butylthiophene): crystal structure and preferred orientation in spherulitic thin films " *Macromolecules*, **43**, 6772-6781 (2010).
11. M. Moreno, M. Casalegno, G. Raos, S. V. Meille and R. Po "Molecular modeling of crystalline alkylthiophene oligomers and polymers" *J. Phys. Chem., B*, **114**, 1591-1502 (2010)
12. P. Arosio, A. Famulari, M. Moreno, G. Raos M. Catellani, S. V. Meille: "Ordered stacking of regioregular head-to-tail polyalkylthiophenes: insights from the crystal structure of form I' poly(3-*n*-butylthiophene" *Chemistry of Materials*, **21**, 78-87 (2009)
13. G. Ricci, A. Boglia, A.C.Boccia, L. Zetta, A. Famulari, S. V. Meille: New Stereoregularity in the Stereospecific Polymerization of Bulky Strained Olefins: Diheterotactic Polynorbornene. *Macromolecules*, **41**, 3109-3113 (2008)
14. G. Allegra, S. V. Meille; Mesomorphic Phases of Flexible Polymers: the Self-Compacting Chain Model, *Macromolecules*, **37**, 3487-3496 (2004)