

## RELAZIONE

Loriano Storchi

|                                             |            |                |
|---------------------------------------------|------------|----------------|
| UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI CHIETI - PESCARA |            |                |
| Dipartimento di FARMACIA - Registratura     |            |                |
| Anno 2025                                   | Titolo VII | 06 Fascicolo   |
| N. 711                                      | 07/03/2025 |                |
| UOR<br>FARMACIA                             | CC         | RPA<br>SCIMONE |

### 1. Posizione

Loriano Storchi in servizio dal 01 Ottobre 2020 come professore associato di Chimica Generale ed Inorganica (SSD CHEM-03/A, AREA 03, GSD 03/CHEM-03 presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università G D'Annunzio di Chieti-Pescara.

### 2. Attività didattica

L'attività didattica svolta da Loriano Storchi nel triennio si è sviluppata negli anno accademico 2022/23 - 2023/24 - 2024/25.

1. Nell'a.a. 2022/23 - 2023/24 - 2024/25 Loriano Storchi è stato docente del Corso di "Computer programming & Data Analysis using Python" per il corso di Dottorato in BBS dell'Università G. D'Annunzio di Chieti-Pescara.
2. Nell'a.a. 2024/25 Loriano Storchi ha svolto il Corso di Conoscenze Preliminari di Chimica per il Corso di Laurea pm TECNOLOGIE ECO-SOSTENIBILI E TOSSICOLOGIA AMBIENTALE presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università G. D'Annunzio di Chieti-Pescara
3. Nell'a.a. 2022/23 - 2023/24 - 2024/25 Loriano Storchi è stato docente del modulo di Chimica dei Materiali (parte del corso integrato di Chimica) 6 CFU per Il Corso Di Laurea in Ingegneria Biomedica presso il Dipartimento di Ingegneria e Geologia dell'Università G. D'Annunzio di Chieti-Pescara
4. Nell'a.a. 2022/23 - 2023/24 - 2024/25 Loriano Storchi è stato docente del modulo di Informatica e (Matematica solo 2019/2020) Laboratorio di Informatica (parte del corso integrato di Statistica ed Informatica 4 CFU) per Il Corso Di Laurea in Tecniche della prevenzione nell'Ambiente e nei Luoghi di Lavoro presso la Scuola di Medicina e Scienze della Salute dell'Università G. D'Annunzio di Chieti-Pescara.
5. Nell'a.a. 2022/23 - 2023/24 - 2024/25 Loriano Storchi è stato docente del modulo di Chimica Generale 6 CFU per Il Corso Di Laurea in TECNOLOGIE ECO-SOSTENIBILI E TOSSICOLOGIA AMBIENTALE presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università G. D'Annunzio di Chieti-Pescara
6. Nell'a.a. 2022/23 - 2023/24 - 2024/25 Loriano Storchi è stato docente del modulo di Elementi di Informatica 3 CFU per Il Corso Di Laurea in TECNOLOGIE ECO-SOSTENIBILI E TOSSICOLOGIA AMBIENTALE presso il Dipartimento di Farmacia dell'Università G. D'Annunzio di Chieti-Pescara

LS

7. Ho tenuto lezioni presso la School "MULTISCALE, MACHINE LEARNING AND QSAR METHODS APPLIED TO BIOMOLECULES", within the THEORETICAL CHEMISTRY AND COMPUTATIONAL MODELLING MASTER PROGRAMME held in Aspet, France, 25th – 29th November 2024.

Accanto alle attività didattiche descritte, Lorianò Storchi è stato attivamente impegnato nella formazione teorica e pratica di studenti e dottorandi che, nel corso del triennio, hanno frequentato il laboratorio informatico del gruppo di Chimica Generale ed Inorganica del Dipartimento di Scienze del Farmaco. Svolgendo anche attività di introduzione alla ricerca bibliografica in ambito scientifico per tutti i laureandi del dipartimento di Farmacia.

### 3. Attività scientifica

Le attività scientifiche svolte da L. S. nel triennio trascorso sono state svolte nel gruppo di Chimica di Chimica Generale ed Inorganica del Dipartimento di Farmacia del suddetto ateneo ma anche in collaborazione con diversi enti di ricerca accademici e privati quali: SCITEC-CNR (Scienze e Tecnologie Chimiche "Giulio Natta") ed I.N.F.N. (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare), Molecular Discovery Ltd.. Diverse sono le tematiche di ricerca che hanno visto impegnato L. S., tutte inerenti l'impiego di tecniche numeriche e computazionali sia in ambito chimico che fisico oltre che prettamente informatico.

- Effetti relativistici in chimica. L'impatto della relatività in chimica negli ultimi anni si è dimostrato di grande importanza, soprattutto quando si prendono in considerazione elementi pesanti. Dunque, ogni qual volta nella struttura di composti molecolari sono coinvolti elementi pesanti, una corretta inclusione degli effetti relativistici nella descrizione di tali sostanze è obbligatoria. Il modo più rigoroso per introdurre tali effetti relativistici nella modellazione di sistemi è quello di adottare il formalismo a quattro componenti, derivato dall'equazione di Dirac. Lorianò Storchi nel triennio ha partecipato attivamente allo sviluppo teorico e computazionale di BERTHA un programma di DFT relativistico a quattro componenti. Lo sviluppo portato avanti da Lorianò Storchi in questo ambito ha condotto, mediante l'uso di tecniche di HPC (High Performance Computing), al miglioramento decisivo del software verso la sua applicazione allo studio di sistemi molecolari di grandi dimensioni.
- Drug Discovery. Durante il corso di questi tre anni Lorianò Storchi ha continuato la sua collaborazione con la Molecular Discovery impegnandosi nello studio ed implementazione di software nell'ambito del Drug Discovery della predizione in-silico di proprietà chimico fisiche, con particolare interesse nell'ambito della predizione di pKa e tautomeria. Sempre nello stesso ambito l'altro tema di particolare interesse è stato il continuo sviluppo di metodi basati sul GRID Forcefield in particolare nella direzione dell'uso di tecniche di Machine-Learning
- High Energy Physics: nell'ambito della collaborazione con l'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare Lorianò Storchi è stato registrato come "Software Engineer" presso il CERN (the European Organization for Nuclear Research) come parte del gruppo CMS (Compact Muon Solenoid) di Perugia.

CS

- Machine Learning: nel corso del triennio l'oriano storchi si è occupato dello sviluppo ed applicazione di tecniche di Machine Learning in diversi contesti. In particolare sviluppando approcci di Deep Learning in grado di estrarre automaticamente caratteristiche rilevanti dai dati di input e catturare relazioni non lineari tra input e output. Partendo ad esempio dal GRID Force Field e usando CNN ho sviluppato un modello di Deep Learning agnostico rispetto alla rotazionale ed alla conformazione e dunque indipendente dall'allineamento che chiamiamo DeepGRID. Allo stesso modo ho sviluppato modelli di Machine Learning basati su tecniche GPR e NN per il fitting di superfici rappresentanti coefficienti di velocità di scattering anelastici. Ho poi sviluppato un semplice approccio combinatorio di machine learning per ottenere formule fisiche basate su ingredienti semplici e facilmente accessibili, come le proprietà atomiche. Queste formule sono utilizzate per predire la stabilità energetica dei composti binari semiconduttori..

#### 4. Organizzazione congressi

1. Co-chair del congresso internazionale REHE – 2020/2022 13th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics, <https://www.rehe2020.it/>
2. Parte del comitato organizzatore del congresso internazionale Molecular Electronic Structure 2024 <https://www.mes2024.it/>

#### 5. Elenco delle pubblicazioni (2022 - 2024)

##### Articoli su riviste internazionali

1. L. Belpassi, L. Storchi, "Foreword to special issue on the 13th international conference on relativistic effects in heavy-element chemistry and physics (REHE-2022) held in Assisi, Italy" Molecular Physics, DOI: 10.1080/00268976.2025.2468591 (2025)
2. L. Storchi within CMS collaboration, "Beam Test Performance Studies of CMS Phase-2 Outer Tracker Module Prototypes", Journal of Instrumentation, DOI: 10.1088/1748-0221/19/10/P10032 (2024)
3. L. Storchi within CMS collaboration, "Measurement of the fractional radiation length of a pixel module for the CMS Phase-2 upgrade via the multiple scattering of positrons", Journal of Instrumentation, DOI: 10.1088/1748-0221/19/10/P10023 (2024)
4. Roberto Paciotti, Nazzareno Re, L'oriano Storchi, "Combining the Fragment Molecular Orbital and GRID Approaches for the Prediction of Ligand-Metalloenzyme Binding Affinity: The Case Study of hCA II Inhibitors", Molecules, DOI: 10.3390/molecules29153600 (2024)
5. Qizhen Hong, L'oriano Storchi, Cecilia Coletti, Jia Li, Quanhua Sun, Jun Li, "Quantum-classical rate coefficient datasets of vibrational energy transfer in carbon monoxide based on highly accurate potential energy surface", The Journal of Chemical Physics, DOI: 10.1063/5.0189772 (2024)
6. Leonardo Aragao, Elisabetta Ronchieri, Giuseppe Ambrosio, Diego Ciangottini, Sara Cutini, Doina Cristina Duma, Pasquale Lubrano, Barbara Martelli, Davide Salomoni, Giusy Sergi,

LS

- Daniele Spiga, Fabrizio Stracci, Lorian Storchi "Air quality changes during the COVID-19 pandemic guided by robust", Air Quality, Atmosphere and Health, DOI: 10.1007/s11869-023-01495-x (2024)
7. L. Storchi within CMS collaboration, "Evaluation of planar silicon pixel sensors with the RD53A readout chip for the Phase-2 Upgrade of the CMS Inner Tracker", Journal of Instrumentation, DOI: 10.1088/1748-0221/18/11/P11015 (2023)
  8. Qizhen Hong, Lorian Storchi, Quanhua Sun, Massimiliano Bartolomei, Fernando Pirani, Cecilia Coletti, "Improved Quantum-Classical Treatment of N<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> Inelastic Collisions: Effect of the Potentials and Complete Rate Coefficient Data Sets", Journal of Chemical Theory Computation, DOI: 10.1021/acs.jctc.3c01103 (2023)
  9. Diego Sorbelli, Paola Belanzoni, Lorian Storchi, Olivia Bizzarri, Beatrice Bizzarri, Edoardo Mosconi, Leonardo Belpassi, "Chemical bond analysis for the entire periodic table: energy decomposition and natural orbitals for chemical valence in the four-component relativistic framework", Molecular Physics, DOI: 10.1080/00268976.2023.2245061 (2023)
  10. Lorian Storchi, Gabriele Cruciani, Simon Cross, "DeepGRID: Deep Learning using GRID descriptors for BBB prediction", Journal of Chemical Information and Modeling, DOI: 10.1021/acs.jcim.3c00768 (2023)
  11. Tommaso Tedeschi, Marco Baiocchi, Diego Ciangottini, Valentina Poggioni, Daniele Spiga, Lorian Storchi, Mirco Tracoli, "Smart Caching in a Data Lake for High Energy Physics Analysis", Journal of Grid Computing, DOI: 10.1007/s10723-023-09664-z (2023)
  12. Qizhen Hong, Lorian Storchi, Massimiliano Bartolomei, Fernando Pirani, Quanhua Sun, Cecilia Coletti, "Inelastic N<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> collisions and quantum-classical rate coefficients: large datasets and machine learning predictions" The European Physical Journal D, DOI: 10.1140/epjd/s10053-023-00688-4 (2023)
  13. L. Storchi within CMS Collaboration, "Test beam performance of a CBC3-based mini-module for the Phase-2 CMS Outer Tracker before and after neutron irradiation", Journal of Instrumentation, DOI: 10.1088/1748-0221/18/04/P04001 (2023)
  14. Matteo De Santis, Diego Sorbelli, Valerie Vallet, Andre' Severo Pereira Gomes, Lorian Storchi, Leonardo Belpassi, "Frozen-Density Embedding for Including Environmental Effects in the Dirac-Kohn-Sham Theory: An Implementation Based on Density Fitting and Prototyping Techniques", Journal of Chemical Theory Computation, DOI: 10.1021/acs.jctc.2c00499 (2022)
  15. Iogann Tolbatov, Lorian Storchi, Alessandro Marrone, "Structural Reshaping of the Zinc-Finger Domain of the SARS-CoV-2 nsp13 Protein Using Bismuth(III) Ions: A Multilevel Computational Study", Inorganic Chemistry, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.2c02685 (2022)
  16. Roberto Paciotti, Lorian Storchi, Alessandro Marrone, "Homodimeric complexes of the 90â€“231 human prion: a multilayered computational study based on FMO/GRIDâ€“DRY approach" Journal of Molecular Modeling, DOI: 10.1007/s00894-022-05244-2 (2022)
  17. L. Storchi within CMS Collaboration, "Beam test performance of a prototype module with Short Strip ASICs for the CMS HL-LHC tracker upgrade", Journal of Instrumentation, DOI: 10.1088/1748-0221/17/06/P06039 (2022)
  18. Udaykumar Gajera, Lorian Storchi, Danila Amoroso, Francesco Delodovici, Silvia Picozzi "Towards machine learning for microscopic mechanisms:a formula search for crystal structure stability based on atomic properties" Journal of Applied Physics, DOI: 10.1063/5.0088177 (2022)

19. Guglielmo D'Amico , Stefania Scocchera , Lorian Storch, "Randentropy: A Software to Measure Inequality in Random Systems", INFORMATICA, DOI: 10.15388/22-INFOR479 (2022)

## Congressi e conference paper

1. Invited speaker at: Accademia dei Lincei, Rome, Quantum chemistry and cheminformatics- 26-27 September 2024, "Machine and Deep Learning techniques in chemistry: an overview from DeepGRID to a simple formula generator"
2. Invited speaker at: University Perugia, Dpt. Chemistry, "Machine and Deep Learning techniques in chemistry: an overview from DeepGRID to a simple formula generator", May, 2024
3. Invited speaker at: VISTEC Vidyasirimedhi Institute of Science and Technology , School of Molecular Science and Engineer 31/05/2022 (Thailand)
4. Invited speaker at: Shoolini Science Web Series Lecture IX- "Four-component Dirac-Kohn-Sham Calculations" 30/06/2021
5. "Machine and Deep Learning techniques in chemistry: from DeepGRID to a simple formula generator", Southern European Conference on the Science of Molecules Perugia, 27-29 September 2023
6. D. Ciangottini, G. Bianchini, M. Mariotti, D. Spiga, L. Storch, G. Surace,, "KServe inference extension for an FPGA vendor-free ecosystem", CHEP2023, REF (2023)
7. R. Di Staso, L. Aragao, E. Ronchieri, L. Storch, D. Spiga, S. Cutini, D. Salomoni, P. Lubrano, "TIME SERIES ANALYSIS OF METEOROLOGICAL PARAMETERS AND AIR POLLUTION CONCENTRATIONS IN EMILIA-ROMAGNA, ITALY, DURING COVID-19 INFECTION", 21st International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, HARMO 2022 <https://pesquisa.bvsalud.org/global-literature-on-novel-coronavirus-2019-ncov/resource/pt/covid-who-2207521> ID: covidwho-2207521 (2022)
8. Daniele Spiga, Diego Ciangottini, Alessandro Costantini, Sara Cutini, Cristina Duma, Jacopo Gasparetto, Pasquale Lubrano, Barbara Martelli, Elisabetta Ronchieri, Davide Salomoni, Giusy Sergi, Lorian Storch, Mirco Tracoli, "Open-source and cloud-native solutions for managing and analyzing heterogeneous and sensitive clinical Data", Proocing of Science, <https://pos.sissa.it/415/022/pdf> (2022)

Chieti,

0/31/2025



Firmato digitalmente da Lorian Storch  
Data: 06.03.2025 12:16:38 CET  
Organizzazione: UNIVERSITA' DEGLI  
STUDI DI CHIETI E  
PESCARA/01335970693