

**PAOLO GIANNOZZI – Curriculum Vitæ**  
(Novembre 2010)

Dal 30 ottobre 2006 Professore di Seconda Fascia, Fisica della Materia (FIS/03) presso:  
Dipartimento di Chimica e Fisica, Università di Udine, Viale delle Scienze 208, I-33100 Udine  
Tel.: +39/0432-558216, fax: 0432-558222,  
e-mail: paolo.giannozzi@uniud.it, www: <http://www.fisica.uniud.it/~giannozz>

**Istruzione**

- 24 Giugno 1982: Laurea in Fisica all'Università di Pisa, con lode, relatore G. Pastori.
- 26 Febbraio 1988: Dottorato all'Università di Losanna (Svizzera): "Propriétés magnétiques du Dioxide d'Uranium: analyse théorique", relatore P. Erdős.

Conoscenza lingue: Francese, Inglese, qualche nozione di Tedesco.

**Esperienza professionale**

- Giugno 1983-Giugno 1988: "Assistant Doctorant" (assistente) all'Istituto di Fisica Teorica dell'Università di Losanna.
- 1 Luglio 1988-Ottobre 1991: Post-Doc all'IRRMA (Institut Romand de Recherche Numérique en Physique des Matériaux), Politecnico Federale di Losanna (EPFL)
- 1 Ottobre 1991 - 29 Ottobre 2006: ricercatore universitario presso la Scuola Normale Superiore di Pisa. Confermato dal 1 ottobre 1994.

Ho inoltre trascorso diversi periodi come scienziato visitatore presso l'università di Princeton (09/1999-08/2001), il CECAM di Lione (01/06-1997), l'IBM di Zurigo (09/12-1993)

**Attività didattica all'Università di Udine**

1. A.A. 2006-2007:  
*Meccanica Quantistica* per Fisica Computazionale (6 crediti, 48 ore)  
*Struttura della Materia* per Fisica Computazionale (6 crediti, 48 ore)  
*Metodi Numerici in Struttura Elettronica* per Fisica Computazionale (6 crediti, 48 ore)
2. A.A. 2007-2008:  
*Meccanica Quantistica e Struttura della Materia*  
*Laboratorio di Strumentazione e Misure Fisiche* per Fisica Computazionale (modulo di 3 crediti, 24 ore)
3. A.A. 2008-2009:  
*Meccanica Quantistica e Struttura della Materia*  
*Meccanica Statistica I* per Fisica Computazionale (modulo di 3 crediti, 24 ore)  
*Fisica III* per Biotecnologie (3 crediti, 30 ore, supplenza)
4. A.A. 2008-2009:  
*Meccanica Quantistica e Struttura della Materia*  
*Fisica I* per Biotecnologie (4 crediti, 32 ore).

Per il corrente A.A. svolgo i corsi di Fisica Moderna per Matematica (6 crediti), *Fisica I* per Biotecnologie (3 crediti, 30 ore), Metodi Numerici in Meccanica Quantistica (CdL magistrale interuniversità di Fisica).

## Attività scientifica (ultimi 3 anni)

### Attività di ricerca

La mia ricerca si svolge nel campo della simulazione numerica da principi primi (teoria del Funzionale Densità) applicata a sistemi nanostrutturati. Gli argomenti specifici di ricerca affrontati nel periodo sono i seguenti:

*Interazione fra molecole di gas e sistemi nanostrutturati di carbonio.* In particolare, ho studiato l'assorbimento di  $\text{NO}_x$  e possibili reazioni chimiche su superfici di nanotubi di carbonio [Ref.2,4]. Questo lavoro è stato realizzato nel quadro di una visita di un anno di uno studente di dottorato cinese. Un altro filone di ricerca è stato condotto nel quadro del progetto regionale NANOCAT, in collaborazione con la SISSA, l'Università di Trieste, il laboratorio CNR IOM-Democritos. Ho studiato l'interazione di molecole di  $\text{NO}_2$  e CO con nanoparticelle di Rh su superfici di grafene. Questi risultati (ottenuti da un'assegnista di ricerca) non sono stati ancora pubblicati.

*Proprietà strutturali e spettri di raggi X di sistemi amorfi di CdTe ossidato.* Il  $\text{CdTeO}_x$  è un materiale di interesse per celle solari. Il lavoro è il frutto di una collaborazione con fisici del Cile. Le proprietà strutturali sono state modellizzate per varie composizioni con la dinamica molecolare da principi primi (Ref.6). Si sono in seguito calcolati gli spettri di assorbimento di raggi X dai modelli così ottenuti (Ref.1). Il confronto con i dati sperimentali ha permesso una caratterizzazione quantitativa dell'ordine locale.

*Nuovi sistemi eterostrutturati: ftalocianine su superfici di semiconduttori.* Lo scopo di questo lavoro (Ref.3,7), in collaborazione con fisici e chimici dell'ISM-CNR di Roma, è la realizzazione di sistemi in cui le proprietà ottiche nonlineari delle ftalocianine possano essere modificate tramite drogaggio della superficie di semiconduttore (GaAs,  $\text{TiO}_2$ ).

*Software scientifico.* Ho coordinato il mantenimento e lo sviluppo di QUANTUM ESPRESSO (<http://www.quantum-espresso.org>): una distribuzione open-source di software per il calcolo di proprietà di materiali dalla struttura elettronica, basato su Teoria del Funzionale Densità, onde piane e pseudopotenziali (Ref.5). Mi sono in particolare occupato della parallelizzazione massiccia (Ref.p1) e dell'esecuzione su GRID (Ref.p2).

### Organizzazione di conferenze, scuole

Sono stato co-organizzatore delle seguenti conferenze e scuole:

- *Latin American School in Computational Materials Science*, Universidad Andrés Bello, Santiago del Cile, 19-30 Gennaio 2009
- *African School on Electronic Structure Methods and Applications*, AIMS (African Institute for Mathematical Sciences) Muizenberg, Città del Capo, Sudafrica, 14-25 Luglio 2008
- *Ninth Int. Symposium on Frontiers of Fundamental and Computational Physics (FFP-9)*, Udine, 7-9 Gennaio 2008 (organizzatore locale)

### Relazioni su invito, partecipazione a scuole come docente

- European-US Summer School on *HPC Challenges in Computational Sciences*, Acerale, Catania, 4-7 ottobre 2010
- *African School on Electronic Structure Methods and Applications*, AIMS (African Institute for Mathematical Sciences) Muizenberg, Città del Capo, Sudafrica, 19-30 Luglio 2010
- WTEC International Workshop on Scalable Software, Arlington, VA, USA, 2-3 Giugno 2010
- Hands on Training School on Molecular and Material Science GRID Applications, Trieste, 29 Marzo - 1 Aprile 2010
- Seminario all'Università di Parigi VI, 3 Novembre 2009
- Tutorial CECAM su *Calculation of Solid-State NMR Parameters using the GIPAW Method*, Zurigo, 21-24 Settembre 2009
- ECSAC09 conference *Grid Computing: a new tool for Science and Innovation*, Veli Losinj (Croazia), 25-30 Agosto 2009
- *GRID Tutorial on Chemical and Material Science Applications*, Trieste, 15-18 Settembre 2008
- Workshop *DFT meets Experiment*, IFW Dresden, 25-28 Agosto 2008
- Scuola su *Plasmas d'hydrogène, Physique des surfaces et Interactions hydrogène-surface*, Alénia, Francia, 8-13 Giugno 2008
- *Calcolo Scientifico nella Fisica Italiana* 2008, Rimini, 29 Maggio 2008

## Publicazioni

### Inviare per la pubblicazione

- s1. *Electron densities and related properties from the ab-initio simulation of crystalline solids*, C. Pisani, R. Dovesi, A. Erba and P. Giannozzi, in *Modern Charge Density Analysis*, Editors: C. Gatti and P. Macchi (Springer, in corso di stampa).

### Apparse su riviste internazionali

1. *Quantitative local environment characterization in amorphous oxides*, A. Amézaga, Erik Holmström, R. Lizárraga, E. Menéndez-Proupin, and P. Giannozzi, *Phys. Rev. B* **81**, 014210 (2010).
2. *Gas adsorption on graphene doped with B, N, Al, S: a theoretical study*, Jiayu Dai, Jianmin Yuan, and P. Giannozzi, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 232105 (2009).
3. *Ab initio theoretical investigation of Phthalocyanine-Semiconductor hybrid systems*, G. Mattioli, F. Filippone, P. Giannozzi, R. Caminiti, and A. Amore Bonapasta, *Chem. Mater.* **21**, 4555-4567 (2009).
4. *Adsorption of pairs of NO<sub>x</sub> molecules on single-wall carbon nanotubes and formation of NO+NO<sub>3</sub> from NO<sub>2</sub>*, Jiayu Dai, P. Giannozzi, and Jianmin Yuan, *Surf. Sci.* **603**, 3234-3238 (2009).
5. *Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*, P. Giannozzi et al., *J. Phys.:Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
6. *Ab-initio molecular dynamics study of amorphous CdTeO<sub>x</sub> alloys: structural properties*, E. Menéndez-Proupin, P. Giannozzi, J. Peralta, and G. Gutiérrez, *Phys. Rev. B* **79**, 014205 (2009).
7. *Theoretical design of coupled organic-inorganic systems*, G. Mattioli, F. Filippone, P. Giannozzi, R. Caminiti, and A. Amore Bonapasta, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 126805 (2008).

### Apparse su resoconti di conferenze

- p2 *Calculation of Phonon Dispersions on the GRID using Quantum ESPRESSO*, R. di Mco, A. Dal Corso, P. Giannozzi, and S. Cozzini, Proceedings of the COST School, Trieste, ICTP Lecture Notes Series, ~~in corso di stampa~~. *Vol. 29, 165-183 (2009)*
- p1. *Large-scale computing with Quantum ESPRESSO*, P. Giannozzi and C. Cavazzoni, *Nuovo Cimento C* **32**, 49 (2009).

Udine, 29 Novembre 2010