

PAOLO GIANNOZZI – Curriculum Vitæ
(Aggiornato a Novembre 2014)

Nato nel 1958 a Poggibonsi (Siena), cittadino italiano, coniugato.

Dal 30 ottobre 2006 Professore (seconda fascia) di Fisica della Materia (FIS/03).

Confermato in ruolo dal 30 ottobre 2009.

Dipartimento di Chimica, Fisica e Ambiente, Università di Udine, Viale delle Scienze 208, 33100 Udine; tel.: +39/0432-558216, fax: 0432-558222, e-mail: paolo.giannozzi@uniud.it, web: <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 il CECAM a Losanna (6-7/2011) e a Lione (1-6/1997), l'Università di Princeton (9/1999–8/2001), i laboratori IBM di Zurigo (9-12/1993).

Riconoscimenti e premi

Dal 2013 sono Fellow of the American Physical Society, Division of Computational Physics. Ho conseguito l'idoneità come professore ordinario all'ASN 2013.

Attività didattica (dal 2010)

A.A. 2010-2011, 2011-2012, 2012-2013, 2013-2014:

Fisica Moderna per L.M. Matematica (6 crediti, 48 ore)

Modulo di Fisica (3 crediti, 30 ore), *Chimica e Fisica Generale* per L.T. Biotecnologie
Metodi Numerici in Meccanica Quantistica per L.M. Fisica (Interateneo con Università di Trieste, 6 crediti, 48 ore).

A.A. 2014-2015:

Fisica Moderna per L.M. Matematica (6 crediti, 48 ore)

Modulo di Fisica I (6 crediti, 60 ore), Ingegneria Gestionale

Metodi Numerici in Meccanica Quantistica per L.M. Fisica (Interateneo con Università di Trieste, 6 crediti, 48 ore).

Sono stato relatore di una tesi per L.T. in Matematica (2011) e di una tesi per L.S. in Matematica (2014)

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 negli ultimi anni sono i seguenti:

Interazione fra molecole di gas e sistemi nanostrutturati di carbonio. Ho studiato con la dinamica molecolare da principi primi l'interazione di molecole di NO_2 con nanoparticelle di Rh supportate su superfici di grafene. Questi risultati (ottenuti da un'assegnista di ricerca nel quadro del progetto regionale NANOCAT, in collaborazione con la SISSA, l'Università di Trieste, il laboratorio CNR IOM-Democritos) sono stati recentemente pubblicati (Ref.77). In precedenza ho studiato l'assorbimento di NO_x e possibili reazioni chimiche su superfici di nanotubi di carbonio (Ref.69) e la reattività di grafene drogato con atomi di B, N, Al, S (Ref. 71). Questo lavoro è stato realizzato nel quadro di una visita di un anno di uno studente di dottorato dalla Cina (Jiayu Dai). Un'altra visita di uno studente di dottorato brasiliano (A. M. Da Silva) è stata l'occasione per studiare l'interazione fra acido nitrico e nanotubi di carbonio (Ref.78).

Simulazione dell'aggregazione di peptidi β -amiloidi indotta da metalli. Questo lavoro, in collaborazione con fisici e biofisici dell'Università di Roma II, consiste in uno studio congiunto teorico (con dinamica molecolare da principi primi) e sperimentale (XAS) del processo di aggregazione di peptidi β -amyloid indotto da ioni Zn e Cu. Tale fenomeno è ritenuto avvenire nel corpo umano durante certe malattie degenerative tristemente note (Ref.74).

Nuovi sistemi ibridi eterostrutturati per celle solari. Lo scopo di questa linea di ricerca, condotta in collaborazione con fisici e chimici dell'ISM-CNR di Roma e dello IOM-CNR di Cagliari, è proporre sistemi, basati su un substrato di ZnO e una Zinco-ftalocianina (ZnPc) come colorante, aventi proprietà ottimali ai fini della realizzazione di celle solari di Graetzel (Ref.78, 75, 73). Di recente tale linea di ricerca ha condotto allo studio congiunto teorico e sperimentale di promettenti sistemi ternari le cui prestazioni sono migliorate da uno strato di polimeri intercalato fra superficie di ZnO e lo strato di ZnPc (ref.79). In precedenza si sono studiati altri dispositivi ibridi in cui le proprietà ottiche nonlineari delle ftalocianine possono essere modificate tramite drogaggio del substrato di semiconduttore (GaAs, TiO_2) (Ref.70).

Proprietà strutturali e spettri di raggi X di sistemi amorfi di CdTe ossidato. Il CdTeO_x amorfo è un materiale di interesse per celle solari. Il lavoro svolto 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. Si sono in seguito calcolati gli spettri di assorbimento di raggi X dai modelli così ottenuti (Ref.72, p29). Il confronto con i dati sperimentali ha permesso una caratterizzazione quantitativa dell'ordine locale.

Software scientifico. Coordino 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.68, b7). Mi sono in particolare occupato di parallelizzazione massiccia (Ref.p26) e dell'esecuzione su GRID (Ref.p27). Sono anche uno dei coordinatori dell'iniziativa CECAM su "Validazione e Verifica" di codici di struttura elettronica: <http://esvv.cecarn.org>. Fra i miei interessi correnti, il confronto di varie metodologie, in particolare pseudopotenziali con metodi all-electrons (Ref.b8).

Organizzazione di conferenze, scuole (dal 2009)

Sono stato co-organizzatore delle seguenti conferenze e scuole:

- *Quantum Espresso Workshop 2014*, Pennsylvania State University, State College, USA, 16-20 Giugno 2014
- Advanced Quantum ESPRESSO Developer Training. ICTP, Trieste, 9-19 Dicembre 2013
- Workshop on Computer Programming and Advanced Tools for Scientific Research Work & The Quantum ESPRESSO Developers Training. ICTP, Trieste, 11-28 Marzo 2013
- *Validation and Verification in Electronic-Structure calculations: state of the art and perspectives*, CECAM, Lausanne, 5-7 Settembre 2012
- *Quantum Espresso Workshop 2012*, Pennsylvania State University, State College, USA, 25-29 Giugno 2012
- *Latin American School in Computational Materials Science*, Universidad Andrés Bello, Santiago del Cile, 19-30 Gennaio 2009

Relazioni su invito, partecipazione a scuole come docente (dal 2009)

- *Computer modelling of materials at the nanoscale: An introduction and hands-on tutorial with the QUANTUM ESPRESSO distribution & YAMBO code*, The University of Tokyo, Hongo campus, 23-26th April 2014
- *Key roles of metallo-organic complexes: from photovoltaics materials to enzymatic structures*, seminario presso ISM-CNR di Montelibretti, 12 Novembre 2013
- Psi-k/CECAM/CCP9 Biennial Graduate School in Electronic-Structure Methods, Oxford, 8-12 Settembre 2013
- Hands-on Tutorial on Electronic Structure Computations, ICTP, Trieste, 14-18 Gennaio 2013
- *2nd African School on Electronic Structure Methods and Applications*, Eldoret, Kenya, 28 Maggio-8 Giugno 2012
- First-principle simulations of Zn-induced aggregation of beta-amyloid peptides, HPC User Day, CINECA, Bologna 7 Maggio 2012
- Joint ICTP-IAEA Workshop on Fusion Plasma Modelling using Atomic and Molecular Data, ICTP, Trieste, 26 Gennaio 2012
- Hands-on Tutorial on Electronic Structure Computations, ICTP, Trieste, 17-21 Gennaio 2011
- European-US Summer School on *HPC Challenges in Computational Sciences*, Acireale, 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

Publicazioni

Lista completa su <http://www.fisica.uniud.it/~giannozz/articoli.html>. Dal 2009:

81. *Photocatalytic and Photovoltaic Properties of TiO₂ Nanoparticles Investigated by Ab Initio Simulations*, G. Mattioli, A. Amore Bonapasta, D. Bovi, P. Giannozzi J. Phys. Chem. C (submitted)
80. *Positional disorder in ammonia borane at ambient conditions*, E. Welchman, P. Giannozzi, T. Thonhauser, Phys. Rev. **B** 89, 180101(R) (2014), DOI: 10.1103/PhysRevB.89.180101.
79. *Interfacial Engineering of P3HT/ZnO Hybrid Solar Cells by Phthalocyanines: a Joint Theoretical Experimental Investigation*, G. Mattioli, S. B. Dkhil, M. I. Saba, G. Mallocci, C. Melis, P. Alippi, F. Filippone, P. Giannozzi, A. Thakur, M. Gaceur, O. Margeat, A. K. Diallo, Ch. Vidélot-Ackermann, J. Ackermann, A. Amore Bonapasta, and A. Mattoni, Adv. Energy Mater. **4**, 1301694 (2014), DOI: 10.1002/aenm.201301694.
78. *Carbonyl Group Generation on Single-Wall Carbon Nanotubes with Nitric Acid: a theoretical description*, A. M. Da Silva, H. F. Dos Santos, P. Giannozzi, G. Mallocci, C. Melis, A. Amore Bonapasta, Chem. Phys. Lett. **582**, 123-128 (2013).
77. *The interaction of nitrogen dioxide with graphene and with Rh clusters stabilized by graphene: a DFT study*, S. Furlan and P. Giannozzi, Phys. Chem. Chem. Phys. **15**, 15896-15904 (2013).
76. *Reaction pathways for oxygen evolution promoted by cobalt catalyst*, G. Mattioli, A. Amore Bonapasta, P. Giannozzi, L. Guidoni, J. Am. Chem. Soc. **135**, 15353-15363 (2013).
75. *Zinc Oxide-Zinc Phthalocyanine interface for hybrid solar cells*, G. Mattioli, C. Melis, G. Mallocci, F. Filippone, P. Alippi, P. Giannozzi, A. Mattoni, A. Amore Bonapasta, J. Phys. Chem. **C** **116**, 15439-15448 (2012), DOI:10.1021/jp303781v.
74. *A study of Zn induced structural aggregation patterns of β -amyloid peptides by ab-initio simulations and XAS measurements* P. Giannozzi, K. Jansen, G. La Penna, V. Minicozzi, S. Morante, G. C. Rossi, F. Stellato, Metallomics, **4**, 156-165 (2012), DOI: 10.1039/C2MT00148A.
73. *Hybrid Zinc Phthalocyanine / Zinc Oxide System for Photovoltaic devices: a DFT and TD-DFPT Theoretical Investigation*, G. Mattioli, F. Filippone, P. Alippi, P. Giannozzi, A. Amore Bonapasta, J. Mater.Chem. **22**, 440-446 (2012), DOI:10.1039/C1JM13605D.

72. *Quantitative local environment characterization in amorphous oxides*, A. Amézaga, Erik Holmström, R. Lizárraga, E. Menéndez-Proupin, P. Bartolo-Pérez, and P. Giannozzi, *Phys. Rev. B* **81**, 014210 (2010).
71. *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).
70. *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).
69. *Adsorption of pairs of NO_x molecules on single-wall carbon nanotubes and formation of NO+NO₃ from NO₂*, Jiayu Dai, P. Giannozzi, and Jianmin Yuan, *Surf.Sci.* **603**, 3234-3238 (2009), on-line at <http://dx.doi.org/10.1016/j.susc.2009.09.010>.
68. *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).
67. *Ab-initio molecular dynamics study of amorphous CdTeO_x alloys: structural properties*, E. Menéndez-Proupin, P. Giannozzi, J. Peralta, and G. Gutiérrez, *Phys. Rev. B* **79**, 014205 (2009).

Book chapters, schools

- b8. *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 ISBN 978-90-481-3835-7 (Springer, 2012).
- b7. *Thermal Properties of Materials from ab-initio Quasi-Harmonic Phonons*, S. Baroni, P. Giannozzi, and E. Isaev, *Rev. Mineral. Geochem.* **71**, 39-57 (2010).

Conference proceedings

- p28. *Core-level shift analysis of amorphous CdTeO_x materials*, R. Lizárraga, Erik Holmström, A. Amézaga, N. Bock, T. Peery, E. Menéndez-Proupin, and P. Giannozzi, *J. Mater. Sci.* **18**, 5071-5076 (2010), DOI: 10.1007/s10853-010-4419-2.
- p27. *Calculation of Phonon Dispersions on the GRID using Quantum ESPRESSO*, R. di Meo, A. Dal Corso, P. Giannozzi, and S. Cozzini, in *Chemistry and Material Science Applications on Grid Infrastructures*, editors: S. Cozzini, A. Laganà, ICTP Lecture Notes Series, Vol. 24, pp.165-183 (2009).
- p26. *Large-scale computing with Quantum ESPRESSO*, P. Giannozzi and C. Cavazzoni, *Nuovo Cimento C* **32**, 49 (Bologna, 2009).

Udine, Novembre 2014

