

Saverio Moroni – Curriculum Vitæ

Settembre 2010

Dati personali

Posizione: Primo ricercatore IOM-CNR, DEMOCRITOS National Simulation Center, Trieste

Indirizzo: SISSA, via Bonomea 265, 34136 Trieste

Tel.: +39 040 3787 412

Fax: +39 040 3787 528

Studi e posti ricoperti

- 1986: Laurea in fisica, Università di Pisa.
- 1987: Incarico di prestazione professionale, Università di Pisa
- 1989-91: Dottorato di ricerca, Università di Pavia
- 1992-93: Assegnatario di corso specializzato, Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste
- 1994-95: Post-doc, Laboratorio FORUM dell'Istituto Nazionale di Fisica della Materia, Pisa
- 1996-98: Post-doc, The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Trieste
- 1998-99: Ricercatore INFN (2+2), UdR Trieste SISSA
- 1999-2005: Primo ricercatore INFN, UdR Roma La Sapienza
- 2005—: Primo ricercatore IOM-CNR, DEMOCRITOS National Simulation Center, Trieste

Permanenze all'estero

- 1991: University of Illinois at Urbana-Champaign, IL, USA
- 1998: Bilkent University, Ankara, Turchia
- 2000: San Diego State University, San Diego, CA, USA
- 2003: University of Alberta, Edmonton, Canada
- 2007: Lorentz Center, Leiden, Netherlands

Attività di ricerca

I miei interessi di ricerca sono rivolti alla fisica computazionale della materia condensata. La mia attività scientifica ha riguardato i seguenti argomenti:

- Struttura elettronica di superfici ed eterostrutture di semiconduttori, con modelli semiempirici tight-binding. In particolare, ho studiato la transizione semimetallo-semiconduttore che avviene nei superreticoli InAs/GaSb all'aumentare del periodo, individuando nell'anisotropia delle bande dei materiali costituenti un meccanismo microscopico *intrinseco* che produce la transizione, precedentemente attribuita esclusivamente alla presenza di impurezze. L'effetto predetto è stato successivamente osservato sperimentalmente.
- Cristallizzazione di liquidi quantistici a $T=0$, e sua rilevanza per uno studio comparativo di diverse approssimazioni per l'energia di scambio e correlazione in Density Functional Theory. Si sono considerati in particolare vari funzionali approssimati che utilizzano la risposta lineare del liquido (diventando quindi esatti nel limite di piccola modulazione), che hanno dato ottimi risultati nello studio della cristallizzazione di liquidi classici. Si è provato che nel caso quantistico, tali funzionali producono eccessiva localizzazione per il solido in tre dimensioni, mentre danno risultati accurati in due dimensioni. Inoltre è stato caratterizzato quantitativamente l'intervallo di lunghezze d'onda in cui la Local Density Approximation riproduce correttamente la risposta lineare statica per sistemi elettronici.
- Studio di proprietà di stato fondamentale e proprietà di equilibrio a temperatura finita di liquidi quantistici (come fattori di struttura, energie, funzioni di risposta statiche, distribuzioni d'impulso, condensazione di Bose-Einstein, transizione superfluida) con il metodo Monte Carlo quantistico (QMC). Tra i contributi su questi temi segnalo (a) il calcolo a tutt'oggi più accurato della risposta statica densità-densità del gas di elettroni in due e tre dimensioni; (b) la determinazione esplicita col metodo variazionale della struttura e della importanza relativa di correlazioni a n corpi; (c) lo studio della transizione di polarizzazione e il calcolo della suscettività di spin del gas di elettroni in due dimensioni; (d) lo sviluppo di un nuovo metodo di simulazione quantistica ("reptation" QMC); (e) lo studio di spettri rotazionali di impurezze molecolari in gocce di elio.

Attività didattica

- A.A. 1999/2000 – 2003/2004 Lezioni e esercitazioni per il corso “Teoria quantistica dei solidi”, paritariamente condivise con il titolare, prof. G.B.Bachelet (CdL Fisica, La Sapienza).
- A.A. 2004/2005, 2005/2006 Lezioni ed esercitazioni del corso “Metodi Numerici Quantistici”, paritariamente condivise con il titolare, prof. G.B.Bachelet (CdL Fisica, La Sapienza).
- A.A. 2001/2002 Esercitazioni per il corso “Laboratorio di calcolo” (CdL Fisica, La Sapienza).
- A.A. 2002/2003, 2003/2004 Esercitazioni per il corso “Laboratorio di Fisica Computazionale” (CdL Fisica, La Sapienza).
- Relatore esterno tesi di laurea quadriennale (La Sapienza):
 - D. Varsano, a.a. 1998/99,
 - F. Lombardo, a.a. 1999/00,
 - C. Attaccalite, a.a. 2000/01,
 - F. Affinito, a.a. 2001/2002,
 - L. Zecca, a.a. 2001/2002,
 - A. Pisano, a.a. 2001/2002,
 - E. Marchetti, a.a. 2002/2003,
 - P. Cazzato, a.a. 2002/2003,
 - F. Mezzacapo, a.a. 2002/2003,
 - G. Giovannetti, a.a. 2003/2004,
 - M. Poggelli, a.a. 2003/2004,
 - S. Piazani, a.a. 2004/2005.
- Relatore esterno tesi di laurea specialistica (La Sapienza):
 - G. Carleo, A/A 2007-2008.
- Relatore di tesi di dottorato:
 - M. Botti (Univ. Roma La Sapienza, 2003),
 - S. Paolini (SISSA, Trieste, 2006),
 - T. Skrbic (SISSA, Trieste, 2009).
- Attualmente supervisore di studenti di dottorato:
 - G. Carleo (SISSA, Trieste),
 - S. Sacconi (SISSA, Trieste).

Relazioni su invito

- Workshop on Quantum and Classical Many-Body Theory in Condensed Matter Physics, ICTP, Trieste, 1991.
- XI Convegno di Fisica Teorica e Struttura della Materia, Fai della Paganella, Trento, 1992.
- CECAM workshop on *Quantum Simulations for Atoms and Molecules*, Paris, 1992.
- XIV Convegno di Fisica Teorica e Struttura della Materia, Fai della Paganella, Trento, 1995.
- European Science Foundation workshop on *Excitations and spin polarized systems*, Trieste, 1995.
- International Conference on *Strongly Coupled Plasma Physics*, Binz, Germany, 1995.
- European Network on Quantum Monte Carlo computations of the electronic structure of solids: workshop on *Real atoms and solids, core and valence electrons*, Roma, 1997.
- *Spring College on Computational Physics*, ICTP, Trieste, 1997.
- Workshop on *Quantum Monte Carlo Simulations of Liquids and Solids*, ICTP, Trieste, 1997.
- NATO ASI on *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*, Cornell University, Ithaca, NY, USA, 1998.
- XI Annual Workshop on *New Methods in Electronic Structure*, NCSA, Urbana, IL (USA), 1999.
- International Workshop on *The nuclear standard model*, Marciana Marina, 2000.
- X Intl. Workshop on *Computational Condensed Matter Physics: Total Energy and Force Methods*, ICTP, Trieste, 2001.
- XX Convegno di Fisica Teorica e Struttura della Materia, Fai della Paganella, Trento, 2001.
- Statistical Mechanics and Condensed Matter Theory, 3rd Giovanni Paladini Memorial, Roma, 2001.
- Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Rolduc Conference Centre, Kerkrade, The Netherlands, 2002.
- The Diffusion Quantum Monte Carlo Method, CECAM, Lyon, France, 2002.
- Annual Symposium of the Theoretical Physics Institute, Banff International Research Center, Canada, 2003.
- XXII Convegno di Fisica Teorica e Struttura della Materia, Fai della Paganella, Trento, 2003.
- International School on Continuum Quantum Monte Carlo Methods, ICTP, Trieste, 2004.
- Electronic Structure beyond Density Functional Theory, Lorentz Center, Leiden, Netherlands, 2004.
- Conference on Computational Physics, Genova, 2004.

- Highlights in the quantum theory of condensed matter, Pisa, 2004.
- 343rd WE-Heraeus-Seminar "Helium clusters", Physikzentrum Bad Honnef, Germany, 2005.
- 13th International Conference on Recent Progress in Many Body Physics, Buenos Aires, Argentina, 2005.
- Workshop on New Developments in Quantum Monte Carlo, Tempe, Arizona, 2006.
- Quantum Monte Carlo Methods, Sardagna (TN), 2006.
- Advances in continuum quantum Monte Carlo methods, CECAM, Lyon, 2007.
- Advanced School on Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry, ICTP, Trieste, 2008.
- Summer school on atomistic simulation techniques for material science, nanotechnology and biophysics, SISSA, Trieste, 2010.
- Quantum Monte Carlo meets Quantum Chemistry: new approaches for electron correlation, CECAM, Lugano, 2010.

Pubblicazioni su riviste

- P. Giannozzi, G. Grosso, S. Moroni and G. Pastori Parravicini, *The ordinary and matrix continued fractions in the theoretical analysis of hermitian and relaxation operators*, Applied Numerical Mathematics 4, 273 (1988).
- G. Grosso, S. Moroni and G. Pastori Parravicini, *Renormalization group study of the electronic structure of surfaces: application to ideal and reconstructed Silicon (100)-(2×1) surface*, Physica Scripta 37, 930 (1988).
- G. Grosso, S. Moroni and G. Pastori Parravicini, *Recursion and renormalization methods in the electronic structure of solids*, Physica Scripta T25, 316 (1989).
- G. Grosso, S. Moroni and G. Pastori Parravicini, *Electronic energy levels of multilayer structures with the renormalization method*, Helvetica Physica Acta 62, 660 (1989).
- G. Grosso, S. Moroni and G. Pastori Parravicini, *Electronic structure of the InAs-GaSb superlattice by the renormalization method*, Phys. Rev. B 40, 12328 (1989).
- S. Moroni and G. Senatore, *Theory of freezing for quantum fluids*, J. Phys. Condens. Matter 2, SA139 (1990).
- S. Moroni and G. Senatore, *Weighted-density functional theories for the freezing of jellium*, Phys. Rev. B 44, 9864 (1991).
- S. Moroni and G. Senatore, *Theory of freezing for quantum fluids: crystallization of ^4He at zero temperature*, Europhys. Lett. 16, 373 (1991).
- S. Moroni, D. M. Ceperley and G. Senatore, *Static response from quantum Monte Carlo calculations*, Phys. Rev. Lett. 69, 1837 (1992).
- S. Moroni and G. Senatore, *Liquid-solid transition in quantal systems, in Density functional theory and its applications*, ed. A. Lidiard, Phil Mag. 69, 957 (1994).
- G. M. D'Ariano, C. Macchiavello and S. Moroni, *On the Monte Carlo simulation approach to the Fokker-Planck equations in quantum optics*, Modern Physics Letters B 8, 239 (1994).
- S. Moroni, D. M. Ceperley and G. Senatore, *Static response and local field factor of the electron gas*, Phys. Rev. Lett. 73, 689 (1995).
- S. Moroni, S. Fantoni and G. Senatore, *Optimization of three-body correlations in liquid helium*, Europhys. Lett. 30, 93 (1995).
- J. Boronat, J. Casulleras, F. Dalfovo, S. Stringari and S. Moroni, *Bounds for the phonon-roton dispersion in superfluid ^4He* , Phys. Rev. B 52, 1236, (1995).
- S. Moroni, S. Fantoni and G. Senatore, *Euler Monte Carlo calculations for liquid ^4He and ^3He* , Phys. Rev. B 52, 13547, (1995).
- S. Moroni, S. Conti and M. P. Tosi, *Monte Carlo simulations of the charged boson fluid at $T=0$* , Phys. Rev. B 53, 9688 (1996).
- S. Moroni, S. Fantoni and G. Senatore, *Momentum distribution of liquid helium*, Czech. J. Phys. 46 S1, 279 (1996).
- S. Moroni and M. Boninsegni, *Monte Carlo study of isotopic liquid helium mixtures*, Czech. J. Phys. 46 S1, 303 (1996).
- S. Moroni, L. Reatto and S. Fantoni, *Optimized shadow wave functions for liquid and solid ^4He* , Czech. J. Phys. 46 S1, 281 (1996).

- A. Fabrocini, S. Moroni and S. Fantoni, *Deep-inelastic response of liquid ^3He* , Czech. J. Phys. **46** S1, 265 (1996).
- G. Senatore, S. Moroni and D. M. Ceperley, *Local field factor and effective potentials in liquid metals*, J. Noncryst. Solids 205–207, 851 (1996).
- S. Moroni, G. Senatore, and S. Fantoni, *Momentum distribution of liquid helium*, Phys. Rev. B **55**, 1040 (1997).
- C. N. Likos, S. Moroni, and G. Senatore, *Density-functional theory of freezing of quantum liquids at zero temperature using exact liquid-state linear response*, Phys. Rev. B **55**, 8867 (1997).
- M. Boninsegni and S. Moroni, *Microscopic calculation of superfluidity and kinetic energies in isotopic liquid helium mixtures*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1727 (1997).
- M. Fornari, H.H.Chen, L. Fu, R. D. Graft, D. J. Lohrmann, S. Moroni, G. Pastori Parravicini, L. Resca and M. A Stroschio, *Electronic structure and wavefunctions of interface states in HgTe–CdTe quantum wells and superlattices*, Phys. Rev. B **55**, (1997).
- S. Moroni and M. Boninsegni, *Bose condensate and structure of isotopic liquid helium mixtures*, Europhys. Lett. **40**, 287 (1997).
- S. Moroni, S. Fantoni, A. Fabrocini, *Deep-inelastic response of liquid helium*, Phys. Rev. B **58**, 11607 (1998).
- S. Moroni, D.E. Galli, S. Fantoni *et al.*, *Variational theory of bulk He-4 with shadow wave functions: Ground state and the phonon-maxon-roton spectrum*, Phys. Rev. B **58**, 909 (1998).
- S. Fantoni, S. Moroni, K. E. Schmidt, *From atomic helium to nuclear matter*, Nucl. Phys. A **649**, 14C (1999).
- S. Baroni, S. Moroni *Reptation quantum Monte Carlo: A method for unbiased ground-state averages and imaginary-time correlations*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4745 (1999).
- F. Pederiva, S. Moroni, S. Fantoni *et al.*, *Quantum Monte Carlo study of the equation of state of solid He-3*, Physica B **284**, 365 (2000).
- M.W. Cole, V.H. Crespi, G. Stan *et al.*, *Condensation of helium in nanotube bundles*, Phys. Rev. Lett. **84**, 3883 (2000).
- S. Moroni, F. Pederiva, S. Fantoni *et al.*, *Equation of state of solid He-3*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2650 (2000).
- M. Boninsegni, S. Moroni, *Ground state of He-4 in one dimension*, J. Low Temp. Phys. **118**, 1 (2000).
- D. Varsano, S. Moroni, G. Senatore, *Spin-polarization transition in the two-dimensional electron gas*, Europhys. Lett. **53**, 348 (2001).
- G. Senatore, S. Moroni, D. Varsano, *Spin effects in the 2D electron gas*, Solid State Commun. **119**, 333 (2001).
- G. Senatore, S. Moroni, D. Varsano, *Spontaneous magnetization of the 2D electron gas*, Comput. Phys. Commun. **142**, 406 (2001).
- C. Attaccalite, S. Moroni, P. Gori-Giorgi, G. B. Bachelet, *Correlation energy and spin polarization in the 2D electron gas*, Phys. Rev. Lett. **88**, 256601 (2002); Erratum, Phys. Rev. Lett. **91**, 109902 (2003).
- P. Gori-Giorgi, C. Attaccalite, S. Moroni S, G. B. Bachelet, *Two-dimensional electron gas: Correlation energy versus density and spin polarization*, Int. J. Quantum Chem. **91**, 126 (2003).

- S. Moroni, A. Sarsa, S. Fantoni, K. E. Schmidt, S. Baroni, *Structure, rotational dynamics, and superfluidity of small OCS-doped He clusters*, Phys. Rev. Lett. **90**, 143401 (2003).
- F.H. Zong, D.M. Ceperley, S. Moroni, S. Fantoni, *The polarization energy of normal liquid He-3*, Mol. Phys. **101**, 1705 (2003).
- S. De Palo, S. Conti, S. Moroni, *Monte Carlo simulations of two-dimensional charged bosons*, Phys. Rev. B **69**, 035109 (2004).
- J. Tang, A.R.W. McKellar, F. Mezzacapo, S. Moroni, *Bridging the Gap between Small Clusters and Nanodroplets: Spectroscopic Study and Computer Simulation of Carbon Dioxide Solvated with Helium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **92**, 145503 (2004); paper selected for the April 19, 2004 issue of Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology.
- P. Cazzato, S. Paolini, S. Moroni, S. Baroni, *Rotational dynamics of CO solvated in small He clusters: A quantum Monte Carlo study*, J. Chem. Phys. **120**, 9071 (2004).
- P. Gori-Giorgi, S. Moroni, G.B. Bachelet, *Pair-distribution functions of the two-dimensional electron gas*, Phys. Rev. B **70**, 115102 (2004).
- S. Moroni, N. Blinov, P.N. Roy, *Quantum Monte Carlo study of helium clusters doped with nitrous oxide: Quantum solvation and rotational dynamics*, J. Chem. Phys. **121**, 3577 (2004).
- S. Moroni, M. Boninsegni, *Condensate Fraction in Liquid ^4He* , J. Low Temp. Phys. **136**, 129 (2004).
- L. Zecca, P. Gori-Giorgi, S. Moroni, G.B. Bachelet, *Local density functional for the short-range part of the electron-electron interaction*, Phys. Rev. B **70**, 205127 (2004).
- S. De Palo, M. Botti, S. Moroni, G. Senatore, *Effects of thickness on the spin susceptibility of the 2D electron gas*, Phys. Rev. Lett **94**, 226405 (2005); Phys. Rev. Lett. **97**, 039702 (2006).
- S. Moroni, M. Botti, S. De Palo, A.R.W. McKellar, *Small para-hydrogen clusters doped with carbon monoxide: quantum Monte Carlo simulations and observed infrared spectra*, J. Chem. Phys. **122**, 094314 (2005).
- S. Moroni, S. Baroni, *Computational spectroscopy of doped Helium clusters*, Computer Physics Communications **163**, 404 (2005).
- S. Baroni, S. Moroni, *Computer simulation of quantum melting in hydrogen clusters*, ChemPhysChem **6**, 1884 (2005).
- S. Paolini, S. Fantoni, S. Moroni, S. Baroni, *Computational spectroscopy of helium-solvated molecules: Effective inertia, from small He clusters toward the nano-droplet regime*, J. Chem. Phys. **123**, 114306 (2005).
- S. Pazziani, S. Moroni, P. Gori-Giorgi, G. B. Bachelet, *Local-spin-density functional for multideterminant density functional theory* Phys. Rev. B **73**, 155111 (2006).
- W. Topic, W. Jäger, N. Blinov, P.-N. Roy, M. Botti, S. Moroni, *Rotational spectrum of Cyanoacetylene solvated with Helium atoms*, J. Chem. Phys. **125**, 144310 (2006).
- S. De Palo, M. Botti, S. Moroni, G. Senatore, *Comment on "Effects of thickness on the spin susceptibility of the two dimensional electron gas" - Reply* Phys. Rev. Lett. **97**, 039702 (2006).

- T. Skrbic, S. Moroni, S. Baroni, *Computational spectroscopy of carbon monoxide isotopomers in helium Clusters* J. Phys. Chem. A **111**, 7640 (2007).
- T. Skrbic, S. Moroni, S. Baroni, *Unraveling excited states of doped helium clusters* J. Phys. Chem. A **111**, 12749 (2007).
- T. Gokmen, M. Padmanabhan, E. Tutuc, M. Shayegan, S. De Palo, S. Moroni, G. Senatore, *Spin susceptibility of interacting two-dimensional electrons with anisotropic effective mass* Phys. Rev. B **76** 233301 (2007).
- S. De Palo, S. Moroni, G. Senatore, *Disorder effect on the spin susceptibility of the two-dimensional one-valley electron gas* J. Phys. A **42**, 214013 (2009).
- M. Marchi, S. De Palo, S. Moroni, G. Senatore, *Correlation energy and spin susceptibility of a two-valley two-dimensional electron gas* Phys. Rev. B **80**, 035103 (2009).
- M. Marchi, S. De Palo, S. Moroni, G. Senatore, *Pair distribution functions of the two-dimensional electron gas with two symmetric valleys* J. Phys. A **42**, 214043 (2009).
- G. Carleo, S. Moroni, S. Baroni, *Zero-temperature dynamics of solid He-4 from quantum Monte Carlo simulations* Phys. Rev. B **80** 094301 (2009).
- M. Casula, S. Moroni, S. Sorella, C. Filippi, *Size-consistent variational approaches to nonlocal pseudopotentials: Standard and lattice regularized diffusion Monte Carlo methods revisited* J. Chem. Phys. **132**, (2010).

Preprints

- G. Carleo, F. Becca, S. Moroni, S. Baroni, *Reptation quantum Monte Carlo for lattice Hamiltonians with a directed-update scheme* arXiv:1003.3696
- G. Carleo, S. Moroni, F. Becca, S. Baroni *The itinerant ferromagnetic phase of the Hubbard model* arXiv:1007.4260

Proceedings

- G. Grosso and S. Moroni, *Electronic states in real space*, in *Highlights on spectroscopies of semiconductors and insulators*, 1, eds. A. Balzarotti, G. Guizzetti and A. Stella (World Scientific, 1989).
- R. D. Graft, G. Grosso, D. J. Lohrmann, L. Martinelli, S. Moroni, G. Pastori Parravicini and L. Resca, *Electronic spectra of solids, impurities and superstructures with the recursion and renormalization methods*, in *Progress on electron properties of solids*, eds. E. Doni, R. Girlanda, G. Pastori Parravicini and A. Quattropani (Kluwer, 1989), p. 409.
- S. Moroni, D. M. Ceperley and G. Senatore, *Static response of 2D electrons from quantum Monte Carlo*, in *Strongly coupled plasma physics*, eds. H. M. Van Horn and S. Ichimaru (University of Rochester Press, 1993), p. 445.
- S. Moroni, D. M. Ceperley and G. Senatore, *The local field of the electron gas*, in *Physics of strongly coupled plasmas*, eds. W. D. Kraeft and M. Schlanges (World Scientific, 1996), p. 429.
- S. Moroni, S. Conti and M. P. Tosi, *Dielectric response and momentum distribution of the degenerate plasma of charged bosons*, in *Physics of strongly coupled plasmas*, eds. W. D. Kraeft and M. Schlanges (World Scientific, 1996), p. 419.
- G. Senatore, S. Moroni, D.M. Ceperley, *Static response of homogeneous quantum fluids by diffusion Monte Carlo*, in *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*, eds. M.P. Nightingale and C.J. Umrigar (Kluwer, 1999).
- S. Baroni, S. Moroni, *Reptation quantum Monte Carlo*, in *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*, eds. M.P. Nightingale and C.J. Umrigar (Kluwer, 1999).
- S. De Palo, S. Moroni and S. Baroni *Derivatives of the fixed-node energy*, in *Quantum Monte Carlo: Recent Advances and Common Problems in Condensed Matter and Field Theory*, eds. M. Campostrini, M.P. Lombardo and F. Pederiva (ETS, Pisa, 2001).
- S. Paolini and S. Moroni, *Free rotation of dopants in superfluid Helium clusters*, in *Recent Progress in Many-Body Theories*, eds. S. Hernandez and H. Cataldo (World Scientific, 2006).
- P. Gori-Giorgi, S. Moroni, and G.B. Bachelet *Static ground-state properties of the 2D electron gas*, in *Condensed Matter Theories Volume 20*, eds. J.W. Clark, R.M. Panoff, and H. Li (Nova Publishers, 2006), pag. 13-21.