

## Barbara Capone - 12 Selected Publications and PhD Thesis

---

1. P. Corsi, E. Roma, T. Gasperi, F. Bruni, B. Capone *"Exploiting Scaling Laws for Polymeric Bottle Brushes: a Theoretical Coarse-Graining for Homopolymeric Branched Polymers"*, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 21, 14873, (2019)
2. P. Corsi, I. Venditti, C. Battocchio, F. Bruni, P. Proposito, F. Mochi, B. Capone *"Designing an optimal ion adsorber at the nanoscale: a simple theoretical model for the unusual nucleation of AgNPs / Co<sup>2+</sup> - Ni<sup>2+</sup> binary mixtures"*, **J. Phys. Chem. C**, 123, 6, 3855, (2019)
3. E. Bianchi, B. Capone, I. Coluzza, L. Rovigatti, P. J. van Oostrum *"Limiting the valence: advancements and new perspectives on patchy colloids, soft functionalized nanoparticles and biomolecules"*, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 2017, 19, 19847 - 19868 This article is part of the themed collection: 2017 PCCP HOT Articles
4. L. Rovigatti B. Capone, C. N. Likos *"Soft self-assembled nanoparticles with temperature dependent properties"*, **Nanoscale**, 8, 3288 (2016) (This paper makes the second cover page of the Nanoscale Issue)
5. T. A. Grünewald, A. Lassenberger, R. Zirbs, B. Capone, P. van Oostrum, I. Vonderhaid, H. Lichtenegger, and E. Reimhult *"Core-shell structure of monodisperse PEG-coated iron oxide nanoparticles for biomedical applications"*, **Chem. Mater.**, 27 (13), 4763 (2015)
6. A. Narros, C. N. Likos, A. Moreno B. Capone *"Multi-blob coarse graining for ring polymer solutions"*, **Soft Matter**, 10, 9601 (2014) (This paper makes the cover page of the Soft Matter Issue)
7. D. Truzzolillo, D. Marzi, J. Marakis, B. Capone, M. Camargo, A. Munam, M. Gauthier, C. N. Likos, D. Vlassopoulos *"Glassy states in asymmetric mixtures of soft and hard colloids"*, **Phys. Rev. Lett.**, 111, 208301 (2013)
8. I. Coluzza, P. van Oostrum, B. Capone, E. Reimhult, C. Dellago, *"Sequence Controlled Self-Knotting Colloidal Patchy Polymers"*, **Phys. Rev. Lett.**, 110, 075501 (2013)
9. B. Capone, I. Coluzza, F. G. Lo Verso, C. N. Likos, R. Blaak, *"Telechelic star polymers as self-assembling units from the molecular to the macroscopic scale"*, **Phys. Rev. Lett.**, 109, 238301 (2012)
10. D. Marzi, C. N. Likos, B. Capone, *"Coarse graining of star polymer colloid nanocomposites"*, **J. Chem. Phys.**, 137, 014902 (2012)
11. B. Capone, I. Coluzza, J.-P. Hansen, *"A systematic coarse-graining strategy for semi-dilute copolymer solutions: from monomers to micelles"*, **J. Phys. Condens. Matter**, 23, (2011)
12. B. Capone, I. Coluzza, J.-P. Hansen, *"Competing micellar and cylindrical phases in semi-dilute diblock copolymer solution"*, **Soft Matter**, 6, 6075 (2010)
13. PhD Thesis "Coarse-graining polymer solutions in the semi-dilute regime" PhD awarded by the University of Cambridge, UK on the 27/11/2010

Date: July 22, 2019

## ELENCO PUBBLICAZIONI INVIATE AI FINI DELLA SELEZIONE

- 1) Finite-time quantum entanglement in propagating squeezed microwaves, Scientific Reports 8, 6416 (2018) (nome file pubb1.pdf);  
Pubblicato online il 23 Aprile 2018. Citazioni: Google Scholar 8; Scopus 5; ISI 4;
- 2) Quantum illumination reveals phase-shift induced cloaking, Scientific Reports 7, 9333 (2017) (nome file pubb2.pdf);  
Pubblicato online il 24 Agosto 2017. Citazioni: Google Scholar 16; Scopus 9; ISI 5;
- 3) Quantum estimation methods for quantum illumination, Physical Review Letters 118, 070803 (2017) (nome file pubb3.pdf);  
Pubblicato online il 17 Febbraio 2017. Citazioni: Google Scholar 22; Scopus 17; ISI 12;
- 4) Algorithmic quantum simulation of memory effects, Physical Review A, 95, 020301(R) (2017) (nome file pubb4.pdf);  
Pubblicato online il 1 Febbraio 2017. Citazioni: Google Scholar 9; Scopus 4; ISI 4;
- 5) Displacement of propagating squeezed microwave states, Physical Review Letters 117, 020502 (2016) (nome file pubb5.pdf);  
Pubblicato online il 7 Luglio 2016. Citazioni: Google Scholar 30; Scopus 19; ISI 18;
- 6) Measuring entanglement in a photonic embedding quantum simulator, Physical Review Letters 116, 070503 (2016) (nome file pubb6.pdf);  
Pubblicato online il 18 Febbraio 2016. Citazioni: Google Scholar 16; Scopus 10; ISI 11;
- 7) Quantum teleportation of propagating quantum microwaves, EPJ Quantum Technology 2 (1), 1-17 (2015) (nome file pubb7.pdf);  
Pubblicato online il 15 Dicembre 2015. Citazioni: Google Scholar 19; Scopus 13; ISI 12;
- 8) Quantum simulation of dissipative processes without reservoir engineering, Scientific Reports 5, 9981 (2015) (nome file pubb8.pdf);  
Pubblicato online il 29 Maggio 2015. Citazioni: Google Scholar 22; Scopus 12; ISI 11;
- 9) Dual-path methods for propagating quantum microwaves, New Journal of Physics 16, 015001 (2014) (nome file pubb9.pdf);  
Pubblicato online il 2 Gennaio 2014. Citazioni: Google Scholar 29; ISI 15;
- 10) Efficient quantum algorithm for computing n-time correlation function, Physical Review Letters 113, 020404 (2014) (nome file pubb10.pdf);  
Pubblicato online il 10 Luglio 2014. Citazioni: Google Scholar 25; ISI 17;

- 11) Embedding quantum simulators for quantum computation of entanglement, Physical Review Letters 111, 240502 (2013) (nome file pubb11.pdf);  
Pubblicato online il 9 Dicembre 2013. Citazioni: Google Scholar 28; ISI 15;
- 12) Path-entanglement of continuous-variable quantum microwaves, Physical Review Letters 109, 250502 (2012) (nome file pubb12.pdf);  
Pubblicato online il 18 Dicembre 2012. Citazioni: Google Scholar 112; ISI 71;

Tesi di dottorato: “Embedding Quantum Simulators”. Tesi discussa il 25/06/2015 presso l’Università dei Paesi Baschi UPV/EHU, in Leioa (Spagna).

## ELENCO PUBBLICAZIONI INVIATE AI FINI DELLA SELEZIONE

1. R.A. Puglisi, S. Caccamo, C. Bongiorno, G. Fisicaro, L. Genovese, S. Goedecker, G. Mannino, A. La Magna "Direct observation of single organic molecules grafted on the surface of a silicon nanowire" *Scientific Reports* **9**(1), 5647 (2019).
2. S.F. Lombardo, G. Fisicaro, I. Deretzis, A. La Magna, B. Curver, B. Lespinasse, K. Huet "Theoretical study of the laser annealing process in FinFET structures" *Appl. Surf. Sci.* **467**, 666-672 (2019).
3. O. Andreussi, N.G. Hormann, F. Nattino, G. Fisicaro, S. Goedecker, N. Marzari "Solvent-aware interfaces in continuum solvation" *J. Chem. Theory Comput.* **15**(3), 1996-2009 (2019).
4. O. Andreussi and G. Fisicaro "Continuum Embeddings in Condensed-Matter Simulations" Review Article, *Int. J. Quantum Chem.* **119**(1), e25725 (2019).
5. G. Fisicaro, M. Sicher, M. Amsler, S. Saha, L. Genovese, and S. Goedecker "Surface reconstruction of fluorites in vacuum and aqueous environment" *Phys. Rev. Materials* **1**(3), 033609 (2017).
6. G. Fisicaro, L. Genovese, O. Andreussi, S. Mandal, N.N. Nair, N. Marzari, and S. Goedecker "Soft-sphere continuum solvation in electronic-structure calculations" *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 3829 (2017).
7. G. Fisicaro, L. Genovese, O. Andreussi, N. Marzari, and S. Goedecker "A generalized Poisson and Poisson-Boltzmann solver for electrostatic" *J. Chem. Phys.* **144** (1), 014103 (2016).
8. Yang Qiu, Fuccio Cristiano, Karim Huet, Fulvio Mazzamuto, Giuseppe Fisicaro, Antonino La Magna, Maurice Quillec, Nikolay Cherkashin, Huiyuan Wang, Sébastien Duguay, and Didier Blavette, "Extended defects formation in nanosecond laser-annealed ion implanted silicon" *Nano Letters* **14**(4), 1769-1775 (2014).
9. G. Fisicaro, L. Pelaz, M. Aboy, P. Lopez, M. Italia, K. Huet, F. Cristiano, Z. Essa, Q. Yang, E. Bedel-Pereira, M. Quillec, and A. La Magna, "Kinetic Monte Carlo simulations of the boron activation in implanted Si under Laser Thermal Annealing", *Applied Physics Express* **7**(2), 021301 (2014).
10. G. Fisicaro, and A. La Magna, Review article "Modeling of laser annealing" *Journal of Computational Electronics* **13**(1) 70-94 (2014).
11. G. Fisicaro, K. Huet, R. Negru, M. Hackenberg, P. Pichler, N. Taleb, A. La Magna "Anomalous Impurity Segregation and Local Bonding Fluctuation in l-Si" *Phys. Rev. Lett.* **110**, 117801 (2013).
12. G. Fisicaro, L. Pelaz, P. Lopez, and A. La Magna "Kinetic Monte Carlo simulations for transient thermal fields: computational methodology and application to the sub-microsecond laser processes in implanted Silicon" *Physical Review E* **86**, 036705 (2012).



Affiliazione: Research and Education Center for Natural Sciences, Keio University

### Elenco delle pubblicazioni presentate

1. D. Yamamoto, H. Ueda, I. Danshita, G. Marmorini, T. Momoi and T. Shimokawa,  
“Exact diagonalization and cluster mean-field study of triangular-lattice XXZ anti-ferromagnets near saturation”,  
Phys. Rev. B **96**, 014431 (2017) [arXiv:1704.04024 [cond-mat]]
2. G. Marmorini, M. Pepe and P. Calabrese,  
“One-body reduced density matrix of trapped impenetrable anyons in one dimension”,  
J. Stat. Mech. (2016) 073106 [arXiv:1605.00838 [cond-mat]]
3. G. Marmorini, D. Yamamoto, and I. Danshita,  
“Umbrella-coplanar transition in the triangular  $XXZ$  model with arbitrary spin”,  
Phys. Rev. B **93**, 224402 (2016) [arXiv:1510.07969 [cond-mat]]
4. D. Yamamoto, G. Marmorini and I. Danshita,  
“Magnetization process of spin-1/2 Heisenberg antiferromagnets on a layered triangular lattice”,  
J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 024706 (2016) arXiv:1510.04402 [cond-mat]
5. D. Yamamoto, G. Marmorini and I. Danshita,  
“Microscopic Model Calculations for the Magnetization Process of Layered Triangular-Lattice Quantum Antiferromagnets”,  
Phys. Rev. Lett. **114**, 027201 (2015) [arXiv:1411.4233 [cond-mat]]  
see also RIKEN Research Highlight
6. R. Yoshii, S. Takada, S. Tsuchiya, G. Marmorini, H. Hayakawa and M. Nitta,  
“Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov states in a superconducting ring with magnetic fields: Phase diagram and the first-order phase transitions”,  
Phys. Rev. B **92**, 224512 (2015) [arXiv:1404.3519 [cond-mat]]
7. G. Marmorini and T. Momoi,  
“Magnon condensation with finite degeneracy on the triangular lattice”,  
Phys. Rev. B **89**, 134425 (2014) [arXiv:1312.5935 [cond-mat]]
8. D. Yamamoto, G. Marmorini and I. Danshita,  
“Quantum Phase Diagram of the Triangular-Lattice  $XXZ$  Model in a Magnetic Field”,  
Phys. Rev. Lett. **112**, 127203 (2014) [Erratum: Phys. Rev. Lett. **112**, 259901 (2014)]  
[arXiv:1309.0086 [cond-mat]]
9. R. Yoshii, G. Marmorini and M. Nitta,

“Spin Imbalance Effect on Josephson Junction and Grey Soliton”,  
J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 094704 (2012)

10. Luca Ferretti, Michele Cortelezzi, Bin Yang, Giacomo Marmorini and Ginestra Bianconi,

“Features and heterogeneities in growing network models”,  
Phys. Rev. E **85**, 066110 (2012) [arXiv:1111.3652 [physics.soc-ph]]

11. R. Yoshii, S. Tsuchiya, G. Marmorini and M. Nitta,

“Spin imbalance effect on Larkin-Ovchinnikov-Fulde-Ferrel state”,  
Phys. Rev. B **84**, 024503 (2011) [arXiv:1101.1578 [cond-mat]]

12. M. Eto, K. Hashimoto, G. Marmorini, M. Nitta, K. Ohashi and W. Vinci,

“Universal reconnection of non-Abelian cosmic strings”,  
Phys. Rev. Lett. **98**, 091602 (2007) [arXiv:hep-th/0609214]

### **Tesi di dottorato**

G. Marmorini, “Non-Abelian solitons and confinement”, Scuola Normale Superiore, Pisa, 2007.

23/07/2019

## ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI SCELTE

1. Francesca Tria, Vittorio Loreto, Vito D.P. Servedio, *Zipf's, Heaps' and Taylor's laws are determined by the expansion into the adjacent possible*. Entropy **2018**, 20(10), 752 (2018).
2. Jason Sakellariou, Vittorio Loreto, Francois Pachet, Francesca Tria, *Maximum entropy model captures melodic styles*. Scientific Reports 7 (1), 9172 (2017).
3. V. Loreto, V.D.P. Servedio, S.H. Strogatz, F.Tria, *Dynamics on expanding spaces: modeling the emergence of novelties*, in: Mirko Degli Esposti, Eduardo G. Altmann, François Pachet (Ed.): Creativity and Universality in Language, pp. 59-83, Springer International Publishing, 2016, ISBN: 978-3-319-24401-3 (2016).
4. G.C. Rodi, V. Loreto, V.D.P. Servedio, and F. Tria, *Optimal learning paths in information networks*, Scientific Report 5, Article number: 10286. doi:10.1038/srep10286 (2015).
5. Francesca Tria, Vito D.P. Servedio, Vittorio Loreto, and Salikoko S. Mufwene, *Modeling the emergence of contact languages*, PLoS ONE 10(4) (2015).
6. F. Tria, V. Loreto, V.D.P. Servedio and S.H. Strogatz, *The dynamics of correlated novelties*, Scientific Report 4, Article number: 5890. doi:10.1038/srep05890 (2014).
7. F. Tria, S. Pompei, V. Loreto, *Dynamically correlated mutations drive human Influenza A evolution*, Scientific Reports 3, Article number: 2705. doi:10.1038/srep02705. (2013).
8. F. Tria, B. Galantucci and V. Loreto, *Naming a structured world: a cultural route to duality of patterning*, PLoS ONE 7(6): e37744 (2012).
9. V. Loreto, A. Mukherjee and F. Tria, *On the origin of the hierarchy of color names*, Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) 109 (18), pag. 6819-6824, (2012).
10. V. Loreto, A. Baronchelli, A. Mukherjee, A. Puglisi and F. Tria, *Statistical physics of language dynamics*, J. Stat. Mech. (2011) P04006.
11. F. Tria, E. Caglioti, V. Loreto and A. Pagnani, *A Stochastic Local Search algorithm for distance-based phylogeny reconstruction*, Molecular Biology and Evolution, 27, 2587-95 (2010).
12. A. Pagnani, F. Tria and M. Weigt, *Classification and sparse-signature extraction from gene-expression data*, J. Stat. Mech. P05001 (2009).

# Barbara Capone - Curriculum vitae

---

Dr. Barbara Capone

---

## RESEARCH FIELDS

Statistical Mechanics, Soft-Condensed Matter

## Main Research Interests

Selective adsorption and release at the nano scale: theoretical design, computational validation and scale up, and close collaboration with experimental groups leading to the experimental realisation and validation of the designed material.

Equilibrium properties and collective behaviours of nanocomposites: aggregation phenomena, clustering, crystallisation and self-assembly.

Development of coarse-grained descriptions of polymeric macromolecular solutions and nanocomposites with focus on dilute and semi-dilute density regimes.

Modelling polymers with different architectures and microscopic interactions: star polymers, multiblock copolymers, brushes under various geometries.

Design of Functionalised Material at the Nano Scale

## Bibliographic Data

h-index = 14 (scopus)

Total Citations = 423 (scopus)

---

## EDUCATION AND RESEARCH EXPERIENCE

04/2018-04/2024 **Abilitazione Scientifica Nazionale** Settore Concorsuale 02/B2, Italian Abilitation for Associate Professorship in the field of Theoretical Condensed Matter Physics.

06/2017-05/2019 **Marie Curie Individual Fellowship** at the Science Department of the **University of Rome 3**, Rome, Italy. Independent Position.

05/2014-05/2017 **APART** (Austrian Programme for Advanced Research and Technology) Fellow of the Austrian Academy of Sciences at the Physics Department of the **University of Vienna, Austria**. Independent Position.

06/2010-05/2014 **University Assistant** at the Physics Department of the **University of Vienna, Austria**, in the group of Prof. Christos N. Likos.

10-2006 - 03/2010 (Academic Year 2008-2009) **Ph. D.** at the Chemistry Department of the **University of Cambridge, United Kingdom**, with a thesis entitled *Coarse-graining polymer solutions in the semi-dilute regime*, under the supervision of Prof. Jean-Pierre Hansen. PhD Sponsored by a **Marie Curie Early Start European Grant**.

11/2000 - 01/2006 (Academic Year 2004-2005) **Master degree in Physics**, final mark 110/110 cum laude, at the Physics Department of the **University of Rome “La Sapienza”** with a thesis on *Off-equilibrium confined dynamics: analytical solution and entropic interpretation*, under the supervision of Dr. Irene Giardina, Prof. Enzo Marinari and Prof. Federico Ricci Tersenghi.

---

#### FELLOWSHIPS, AWARDED PROJECTS, ROLE COVERED IN EACH PROJECT AND ABILITY TO ATTRACT FUNDING

Winner of a **“Tenure Track Assistant Professor Position”** at the Eindhoven University of Technology, in the Department of Chemical Engineering and Chemistry (2018)

**PI of a “Marie Curie Individual Fellowship”** (2017-2019) score 94,20% , **168.227 euros awarded.**

**PI of an “APART (Austrian Programme for Advanced Research and Technology) Fellowship** of the Austrian Academy of Sciences” (2014-2017) at the Physics Department of the University of Vienna, Austria. Total amount **213.000 euros awarded.**

**Early Stage Researcher with a “Marie Curie Early Research Grant”** for a PhD at the University of Cambridge, UK (2006-2009) under the supervision of Prof. J.-P. Hansen

**PI and Coordinator** of the **“European Physical Society Special Activity Fund”**, a Scientific Dissemination Project that took place in Bethlehem in August 2018 in partnership with the European Physical Society, Bethlehem University. The project has been awarded with **5.000 euros.**

Currently in evaluation:

**PI of the University of Roma Tre node** of the **“Why Knot” European Training Network (ETN)** made of 10 European Universities 3 partner universities from the U.S.A. and 3 industrial partners dedicated to the research on the topological properties of polymer and biopolymers. *The proposal is currently in evaluation.* In this project I also cover the role of PI and head of the communication work package.

---

#### INVITED AND CONTRIBUTED TALKS AT INTERNATIONAL CONFERENCES AND WORKSHOPS 31 TALKS OUT OF WHICH 16 INVITED

1. Invited Talk at the “Black Forest Meeting on Anomalous Diffusion”, 23-25/9/2019 König Karls Bad”, Germany

2. Talk presented at the “5th International Soft Matter Conference (ISMC2019) ”, 3-7/6/2019 Edinburgh, United Kingdom
3. Invited Talk at the Challenges in Large Scale Biomolecular Simulation 2019: Bridging Theory and Experiments, 13-19/5/2019 Cargese, Corsica, France
4. Invited Talk at the Venice Meeting on Fluctuations in Small Complex Systems IV, 13-18/10/2018, Venice, Italy
5. Talk presented at WaterX: exotic properties of water under extreme conditions, 3-8/6/2018, La Maddalena, Italy
6. Invited Talk at “CMD27, 2018 Joint Meeting of the DPG and EPS Condensed Matter Division”, 11-16/3/2018, Berlin, Germany
7. Talk presented at FisMat 2017, 1-6/10/2017, Trieste, Italy
8. Invited talk at Physics@Veldhoven 17/1/2017, Veldhoven, Netherlands
9. Talk presented at “European Colloid and Interface Society (ECIS)”, 4-9/9/2016, Rome, Italy
10. Invited Talk at the EPS Board Meeting, at the round table “Physics for Sustainable Development”, 1-2/4/2016, Mulhouse, France
11. Talk presented at “FisMat 2015” , 28/9-2/10 2015, Palermo, Italy
12. Talk presented at the “Congresso Nazionale SIF” 21-25/9/2015 Rome, Italy
13. Invited Talk at the “4th EPS Young Minds Leadership Meeting”, 29-30/5/2015, Barcelona, Spain
14. Invited talk as Plenary Speaker at the United Nations Seminar on Assistance to Palestinian People “*Speeding up Relief, Recovery and Reconstruction in Post-War Gaza?*” 31/3-1/4/2015, Vienna, Austria
15. Invited talk at the “XII International Symposium of University Professors”, 26-27/6/2015, Rome, Italy
16. Invited talk at the “Knots in Soft Condensed Matter” CECAM Workshop, 10-13/9/2014, Vienna, Austria
17. Invited talk at the “Physics of colloidal particles with heterogeneously patterned surfaces” CECAM Workshop, 24-27/9/2014, Vienna, Austria
18. Talk at the “Molecular Liquids and Soft Matter: from Fundamentals to Applications” conference, 7-12/9/2014, Rome, Italy
19. Talk at the “9th Liquid Matter Conference”, 21-25/7/2014, Lisbon, Portugal
20. Invited talk at the Jülich Forschungszentrum 18/11/2013, Jülich, Germany
21. Talk presented at “3rd International Soft Matter Conference” 15-19/9/2013, Rome, Italy
22. Talk presented at the ACS Workshop “Multiscale Modelling of Complex Systems” 8-12/9/2013, Indianapolis, USA

23. Talk presented at “Physics of Complex Colloids - COMPLOIDS 2013” 14-18/5/2013, Ljubljana, Slovenia
24. Invited talk at the University of Rome “La Sapienza” 26/4/2013, Rome, Italy
25. Invited talk at the SISSA workshop on “Statistical Physics of Bio-molecules”, 20-21/12/2012, Trieste, Italy
26. Invited talk at the CECAM workshop on “Design of self-assembling materials”, 04-07/09/2012, Vienna, Austria
27. Talk presented at the International workshop “Micro Structure, setting and aging of cement. From soft Matter Physics to sustainable materials”, 12-16/8/2012, Monte Verità, Switzerland. This talk won the **CFS award for the best contribution given by a young scientist at the workshop**
28. Invited talk at the CECAM-RA workshop on “Coarse-Graining Strategies and Methodologies for Polymeric and Biomolecular Assemblies”, 05-08/07/2011, Lyon, France
29. Talk presented at the “SoftComp Annual meeting”, 16-18/5/2011, Heraklion, Greece
30. Talk presented at “2nd International Soft Matter Conference”, 5-8/7/2010, Granada, Spain
31. Talk presented at the “EuroSim” first Annual meeting, May 2007, Lyon, France

---

## POSTERS

1. Poster presented at the “8th Liquid Matter Conference 2011”, 6-10/09/2011, Vienna, Austria, *Self-Assembly in block copolymer stars*
2. Poster presented at the “7th Liquid Matter Conference”, Lund, Sweden, 27/06-1/07/2008, *Diblock Copolymer self-assembly*
3. Poster presented at the “Soft, Complex and Biological Matter SOCOBIM” Conference, Città del Mare, 15-19/07/2007, Palermo (Cinisi), Italy, *Exploring the semi-dilute regime for polymer solutions*

---

## ORGANISED CONFERENCES AND WORKSHOPS

1. **CECAM Workshop** (21-24/2/2017) “Challenges across Large-Scale Biomolecular and Polymer Simulations” organised by Ivan Coluzza, Samuela Pasquali, Barbara Capone, Christoph Dellago, Tamar Schlick, Vienna,
2. **CECAM Workshop** (29/11-2/12/2016) “Water at interfaces: from proteins to devices” organised by Valentino Bianco, Ivan Coluzza, Barbara Capone, Christoph Dellago, Vienna
3. **CECAM Workshop** (5-9/7/2011) “Coarse Graining Strategies and Methodologies for Polymeric and Biomolecular Assemblies” organised by Barbara Capone, Christos N. Likos, Jean-Pierre Hansen and Vincent Krakoviack, Lyon, France

4. Member of the local organising committee of the “**8th Liquid Matter Conference**”, Vienna, 6-10/9/2011
5. **ACS Workshop** (8-12/9/2013 ) “Multiscale Modelling of Complex Systems”, organised by Marina Guenza and Barbara Capone, 246th National Meeting of the American Chemical Society, Indianapolis

---

#### REFEREEING, EVALUATION AND EDITORIAL ACTIVITIES

**Member of the European Sounding Board** of the **H2020** Rethink European Project

**Review Editor and Member of the Editorial Board** of Soft Matter Physics, specialty section of Frontiers in Physics

**Member of the Editorial Board** of Journal of Physics Communications (IOP)

**Scientific evaluator** of the Partnership Programme PCCA of the Romanian National Council for Research and Development

**External Reviewer** for the Netherlands Organisation for Scientific Research

**Referee** for the following international journals:

*Langmuir,*  
*Nano Letters,*  
*Physical Review Letters,*  
*Soft Matter,*  
*Europhysics Letters,*  
*Journal of Chemical Physics,*  
*Macromolecules,*  
*Journal of Polymer Science B,*  
*Colloid and Polymer Science,*  
*JPCM,*  
*Polymers,*  
*Chemical Reviews*

---

#### TEACHING EXPERIENCE

1. External examiner and member of the evaluating committee for the PhD Thesis of Negar Nahali at SISSA (Trieste, Italy), under the supervision of Dr. Angelo Rosa. The PhD defence took place on the 18-19/10/2017.
2. Laboratory Scientific Computing, Department of Physics, University of Vienna, academic year 2014-2015



3. Exercise classes for Classical Mechanics, University of Vienna, academic year 2013-2014. Course hold by Prof. C. N. Likos
4. Laboratory Scientific Computing, Department of Physics, University of Vienna, academic year 2013-2014
5. Exercise classes for Dynamics of Condensed Matter Systems (Physik IV), Department of Physics, University of Vienna, academic year 2012-2013. Course hold by Prof. Thomas Pichler and Prof. Jannik Meyer
6. Exercise classes for Electrodynamics, Department of Physics, University of Vienna, academic year 2012-2013. Course hold by Prof. C. N. Likos
7. Laboratory Scientific Computing, Department of Physics, University of Vienna, academic year 2012-2013
8. Exercise classes for Dynamics of Condensed Matter Systems (Physik IV), Department of Physics, University of Vienna, academic year 2011-2012. Course hold by Prof. Wolfgang Pfeiler
9. Exercise classes for Electrodynamics, Department of Physics, University of Vienna, academic year 2011-2012. Course hold by Prof. C. N. Likos
10. Exercise classes for Electrodynamics, Department of Physics, University of Vienna, academic year 2010-2011. Course hold by Prof. C. N. Likos
11. Supervision of the Statistical Mechanics course (exercise classes), Department of Chemistry, University of Cambridge, academic year 2008-2009. Course hold by Prof. D. Frenkel
12. Exercise classes for computational Science, Department of Chemistry, University of Cambridge, academic year 2006-2007
13. Supervision of the Statistical Mechanics course (exercise classes), Department of Chemistry, University of Cambridge, academic year 2007-2008. Course hold by Prof. J.-P. Hansen

---

#### SUPERVISION OF GRADUATE STUDENTS

**Supervision** of the graduate student Pietro Corsi, and currently **tutoring** of Pietro Corsi as a PhD student. Results are published in

1. P. Corsi, E. Roma, T. Gasperi, F. Bruni, B. Capone “*Exploiting Scaling Laws for Polymeric Bottle Brushes: a Theoretical Coarse-Graining for Homopolymeric Branched Polymers*”, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 21, 14873, (2019)
2. P. Corsi, I. Venditti, C. Battocchio, F. Bruni, P. Prossposito, F. Mochi, B. Capone “*Designing an optimal ion adsorber at the nanoscale: a simple theoretical model for the unusual nucleation of AgNPs /  $\text{Co}^{2+}$  -  $\text{Ni}^{2+}$  binary mixtures*”, **J. Phys. Chem. C**, 123, 6, 3855, (2019)

Submitted publications are:

1. P. Corsi, E. Roma, F. Bruni, T. Gasperi, B. Capone “*Tuning Macromolecular Adsorption Selectivity through Geometry: Bottlebrushes as Super-Selective Adsorbers in Aqueous Solution*” submitted (2019)

2. E. Roma, P. Corsi, M. Willinger, B. Capone, R. Zirbs, F. Bruni, E. Reimhult, T. Gasperi, “*Thermoresponsive Star Block-Copolymer grafted on Iron Oxide Nanoparticle for the selective removal of pollutants in Aqueous Solutions*”, submitted (2019)
3. P. Corsi, E. Roma, A. Gonzàles Garcia, R. Tuinier, F. Bruni, E. Reimhult, T. Gasperi, B. Capone “*Tunable Thermosensible Star Polymers for Controlled Adsorption in Aqueous Solution*”, submitted (2019)

**Co-supervision** of the PhD student Daniela Marzi, Marie Curie PhD student in the group of Christos N. Likos, within the COMPLOIDS network at the University of Vienna, with a thesis on Star-Colloid mixtures and nanocomposites. PhD completed in 2014. Results of the collaboration are published in

1. D. Marzi, C. N. Likos, B. Capone, “*Coarse graining of star polymer colloid nanocomposites*”, **J. Chem. Phys.** 137, 014902 (2012)
2. D. Truzzolillo, D. Marzi, J. Marakis, B. Capone, M. Camargo, A. Munam, M. Gauthier, C. N. Likos, D. Vlassopoulos “*Glassy states in asymmetric mixtures of soft and hard colloids*”, **Phys. Rev. Lett.**, 111, 208301 (2013)
3. D. Marzi, B. Capone, J. Marakis, M. Consiglia Merola, D. Truzzolillo, D. Cipelletti, F. Moingeon, M. Gautier D. Vlassopoulos, C. N. Likos, M. Camargo “*Depletion, melting and reentrant solidification in mixtures of soft and hard colloids*”, **Soft Matter** 11, 8296 (2015)

---

## PUBLICATIONS

### Submitted (2019)

1. P. Corsi, E. Roma, F. Bruni, T. Gasperi, B. Capone “*Tuning Macromolecular Adsorption Selectivity through Geometry: Bottlebrushes as Super-Selective Adsorbers in Aqueous Solution*” submitted (2019)
2. E. Roma, P. Corsi, M. Willinger, B. Capone, R. Zirbs, F. Bruni, E. Reimhult, T. Gasperi, “*Thermoresponsive Star Block-Copolymer grafted on Iron Oxide Nanoparticle for the selective removal of pollutants in Aqueous Solutions*”, submitted (2019)
3. P. Corsi, E. Roma, A. Gonzàles Garcia, R. Tuinier, F. Bruni, E. Reimhult, T. Gasperi, B. Capone “*Tunable Thermosensible Star Polymers for Controlled Adsorption in Aqueous Solution*”, submitted (2019)
4. T. Cocchiaro, C. Meneghini, A. Dal Lago, C. Fabiani, M. Amodei, D. Miriello, C. Meneghini, B. Capone, A. Lenzi and R. Rago “*Assessment of Sexual and Emotional distress in infertile couple: validation of a new specific psychometric tool*”, submitted (2019)
5. B. Capone, C. N. Likos, I. Coluzza “*Tuning and Controlling the 2D crystal ordering of self-assembled patches on di-block copolymer brushes*”, submitted (2019)

### Published

1. P. Corsi, E. Roma, T. Gasperi, F. Bruni, B. Capone “*Exploiting Scaling Laws for Polymeric Bottle Brushes: a Theoretical Coarse-Graining for Homopolymeric Branched Polymers*”, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 21, 14873, (2019)

2. P. Corsi, I. Venditti, C. Battocchio, F. Bruni, P. Proposito, F. Mochi, B. Capone “*Designing an optimal ion adsorber at the nanoscale: a simple theoretical model for the unusual nucleation of AgNPs / Co<sup>2+</sup> - Ni<sup>2+</sup> binary mixtures*”, **J. Phys. Chem. C**, 123, 6, 3855 , (2019)
3. B. Capone, E. Locatelli “*Design of Polymeric Self-Assembling Materials and Nanocomposites in the Semi-dilute Density Regime: Multiscale Modeling*”, chapter contribution in the book “*Design of self-assembling materials*”, pages 1-45, Springer International Publishing ISBN number 978-3-319-71576-6, (2017)
4. E. Bianchi, B. Capone, I. Coluzza, L. Rovigatti, P. J. van Oostrum “*Limiting the valence: advancements and new perspectives on patchy colloids, soft functionalized nanoparticles and biomolecules*”, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19, 19847 (2017) This article is part of the themed collection: 2017 PCCP HOT Articles
5. B. Capone, F. Bruni “*Designing Nanomaterials for Sustainable Development*” **Il Nuovo Saggiatore**, Vol. 33, n. 5-6 (2017)
6. I. C. Garlea, E. Bianchi, B. Capone, L. Rovigatti, C. N. Likos Current Opinion in Colloid and Interface Science “*Hierarchical Self-Organization of Soft Patchy Nanoparticles into Morphologically Diverse Aggregates*”, **Current Opinion in Colloid & Interface Science**, 1-7, Vol. 30, (2017)
7. E. Locatelli, B. Capone, C. N. Likos “*Multiblob coarse-graining for mixtures of long polymers and soft colloids*”, **J. Chem. Phys.** 145, 17 , 174901 (2016)
8. L. Rovigatti B. Capone, C. N. Likos “*Soft self-assembled nanoparticles with temperature dependent properties*”, **Nanoscale**, 8, 3288 (2016) (This paper makes the second cover page of the Nanoscale Issue)
9. A. Nikoubashman, N. A. Mahynski, B. Capone, A. Z. Panagiotopoulos, and C. N. Likos, “*Coarse-graining and phase behavior of model star polymer-colloid mixtures in solvents of varying quality*”, **J. Chem. Phys.**, 143 , 243108 (2015)
10. D. Marzi, B. Capone, J. Marakis, M. Consiglia Merola, D. Truzzolillo, D. Cipelletti, F. Moingeon, M. Gautier D. Vlassopoulos, C. N. Likos, M. Camargo “*Depletion, melting and reentrant solidification in mixtures of soft and hard colloids*”, **Soft Matter**, 11, 8296 (2015)
11. T. A. Grünwald, A. Lassenberger, R. Zirbs, B. Capone, P. van Oostrum, I. Vonderhaid, H. Lichtenegger, and E. Reimhult “*Core-shell structure of monodisperse PEG-coated iron oxide nanoparticles for biomedical applications*”, **Chem. Mater.**, 27 (13), 4763 (2015)
12. R. Blaak, B. Capone, C. N. Likos, and L. Rovigatti, “*Accurate Coarse-Grained Potentials for Soft Matter Systems, in Computational Trends in Solvation and Transport in Liquids – Lecture Notes*”, edited by G. Sutmann, J. Grotendorst, G. Gompper, and D. Marx. Forschungszentrum Jülich, IAS Series, Vol. 28 (2015), ISBN 978-3-95806-030-2.
13. E. Bianchi, B. Capone , G. Kahl and C. N. Likos “*Soft-patchy nanoparticles: modeling and self-organization*”, **Faraday Discuss.**, 181, 123 (2015)
14. A. Narros, C. N. Likos, A. Moreno B. Capone “*Multi-blob coarse graining for ring polymer solutions*”, **Soft Matter**, 10, 9601 (2014) (This paper makes the cover page of the Soft Matter Issue)

15. D. Truzzolillo, D. Marzi, J. Marakis, B. Capone, M. Camargo, A. Munam, M. Gauthier, C. N. Likos, D. Vlassopoulos “*Glassy states in asymmetric mixtures of soft and hard colloids*”, **Phys. Rev. Lett.**, 111, 208301 (2013)
16. B. Capone, I. Coluzza, F. G. Lo Verso, R. Blaak, C. N. Likos “*Hierarchical self-assembling of telechelic star polymers: from soft patchy particles to diamond crystals*”, **New. J. Phys.**, 15, 095002 (2013)
17. I. Coluzza, P. van Oostrum, B. Capone, E. Reimhult, C. Dellago, “*Sequence Controlled Self-Knotting Colloidal Patchy Polymers*”, **Phys. Rev. Lett.**, 110, 075501 (2013)
18. I. Coluzza, P. van Oostrum. B. Capone, E. Reimhult, C. Dellago, “*Design and folding of colloidal patchy polymers*”, **Soft Matter** 9, 938 (2013)
19. B. Capone, I. Coluzza, F. G. Lo Verso, C. N. Likos, R. Blaak, “*Telechelic star polymers as self-assembling units from the molecular to the macroscopic scale*”, **Phys. Rev. Lett.**, 109, 238301 (2012)
20. D. Marzi, C. N. Likos, B. Capone, “*Coarse graining of star polymer colloid nanocomposites*”, **J. Chem. Phys.**, 137, 014902 (2012)
21. I. Coluzza, B. Capone, J.-P. Hansen, “*Rescaling of structural length scales for “soft effective segment” representation of polymers in good solvent*”, **Soft Matter**, 7, 5255 (2011)
22. B. Capone, I. Coluzza, J.-P. Hansen, “*A systematic coarse-graining strategy for semi-dilute copolymer solutions: from monomers to micelles*”, **J. Phys. Condens. Matt.**, 23, (2011)
23. B. Capone, I. Coluzza, J.-P. Hansen, “*Competing micellar and cylindrical phases in semi-dilute diblock copolymer solution*”, **Soft Matter**, 6, 6075 (2010)
24. J. J. Molina, C. Pierleoni, B. Capone, J.-P. Hansen, I. Saulo Santos de Oliveira, “*Crystal Stability of Diblock Copolymer Micelles in Solution*”, **Molecular Physics**, 107, 4 (2009)
25. B. Capone, C. Pierleoni, J.-P. Hansen, V. Krakoviack, “*Entropic self-assembly of diblock copolymers into disordered and ordered micellar phases*”, **J. Phys. Chem. B**, 113, 12, part of the PGG (Pierre-Gilles de Gennes) Memorial Issue (2009)
26. C. Pierleoni, B. Capone, J.-P. Hansen, “*A soft-effective segment representation of semi-dilute polymer solutions*”, **J. Chem. Phys.**, 127, 17 (2007)
27. B. Capone, T. Castellani, I. Giardina and F. Ricci Tersenghi, “*Off equilibrium confined dynamics in a glassy system with level crossing states*”, **Phys. Rev. B**, 74, 1 (2006)

## Master and PhD Thesis

1. Master Thesis “Off-equilibrium confined dynamics: analytical solution and entropic interpretation” academic year 2004-2005 - defended 26/1/2006
2. PhD Thesis “Coarse-graining polymer solutions in the semi-dilute regime” PhD awarded 27/11/2010

---

### THIRD MISSION

**Founder and C.E.O** of the **International N.G.O. Sunshine4Palestine** (registered in UK, Palestine and Italy), association that aims at **developing sustainable alternative for assessing energy and water needs in emergency situations**.

The work of the N.G.O. was **recognised by the United Nations** and as C.E.O. I have been invited to relate as a [plenary speaker](#) at the **United Nations Seminar on Assistance to Palestinian People “Speeding up Relief, Recovery and Reconstruction in Post-War Gaza?”** that took place in Vienna, 31 March-1 April 2015.

In 2014 the N.G.O. **installed a modular plant on the Jenin Charitable Hospital in Gaza**. Prior to the installation of the plant the hospital could only work 4 hours a day. Now thanks to the first modulus of the Sunshine4Palestine plant, the hospital has 17 hours of operation time per day, completely off grid.

In February 2017 the N.G.O. started a **scientific dissemination project at the Bethlehem University**; An **agreement between the NGO, Bethlehem University and the European Physical Society** lead the creation of the Science4People section, that is carrying on an **extensive scientific dissemination project** in public, private schools in the west bank. The partnership with the European Physical Society and Bethlehem University lead to the creation of the Science4People Young Mind Section in Bethlehem.

The N.G.O. is currently in **partnership** with the **Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP), the European Physical Society, Beni Mellal University in Morocco and Bethlehem University** in Palestine for the creation of a *network of mediterranean Fablabs*. In April 2014 as a **collaboration between our N.G.O, the European Physical Society and the ICTP** brought *4 members of the Bethlehem Science4People to Trieste* where the group took a 2 weeks training course course at the ICTP in its SciFabLab maker space learning how to mount, unmount and program a 3D printer. A brief overview of the collaboration can be found [here](#).

In August 2018 the N.G.O. lead **5 days of Scientific Dissemination Project in Bethlehem** that involved the whole municipality; the project saw **5 days of training, and a science fair** that has been organised in partnership with Bethlehem Municipality, Bethlehem University and the European Physical Society and saw the participation of **more than 2000 people**. Such a project has been **funded by the EPS Activity Fund**.

In September 2019 in collaboration with the University of Beni Mellal and the EPS, the N.G.O. will organise at the University of Beni Mellal a **workshop on the topics of Science for Sustainable Development in the Mediterranean** with specific focus on Water Management and Education.

The scientific activities in the field of Scientific Dissemination and Physics for Development have been highlighted in an interview on the EPS Fact and Info from the European Physical Society entitled [“Portrait of Barbara Capone: when dreams come true”](#) and on several Italian national newspapers as [27esima ora, Il Corriere della Sera](#) or [Io Donna, Corriere della Sera](#)

The research lines on the Science for Sustainable Development gathered the attention of **many international scientific institutions**:

In April 2016, I was invited by the **European Physical Society** (EPS) to participate as speaker in a seminar on "Science and Development, Physics for Sustainable Development" at the EPS Board Meeting.

In September 2016, I was an invited speaker at **Austrian Physical Society** Annual Meeting, and asked to hold a seminar on the issues of "Science and Sustainable Development" and at the **Hungarian** school of excellence **Bolay College**, Budapest, to give a lecture on the impact of scientists and science for sustainable development.

In January 2017 I was an invited speaker with the topic "Development in emergency situation" at the Physics@Veldhoven, the annual congress of the **Dutch Physics Community**.

---

#### PRESS RELEASES (IN ITALIAN)

11/2018 ["Nanoparticles against pollutants"](#), Platinum, Il Sole 24 ore

A brief selection amongst the over 100 articles that have been published on the Italian Newspapers, web journals or radios concerning the third mission activities:

20/5/2017 Article on Io Donna del Corriere della Sera entitled ["Insegnare la scienza, in Palestina"](#)

22/11/2016 Article on La 27 Ora del Corriere della Sera entitled ["Barbara, dalla fisica teorica al progetto per dare la luce a Gaza"](#)

28/2/2015 Article on Io Donna del Corriere della Sera entitled ["Luce sulla Striscia"](#)

24/2/2015 Interview at the National Rai Radio1 at the program ["La radio ne parla"](#)

19/2/2015 Article on Il Manifesto entitled ["Palestina Solare"](#)

---

#### INTERNATIONAL PRESS RELEASES:

11/05/2017 Article on *Horizon, the EU Research and Innovation magazine*:  
**FRONTIER RESEARCH: Microscopic Lego to keep scientists busy "for next 50 years"**  
[\(link\)](#)

17/01/2013 Press releases by *ScienceDaily*:  
**Soft Nanoscale "Lego" Built in the Computer** – Barbara Capone of the Computational Physics Group of the University of Vienna has developed a new method for the construction of building blocks at the nanoscale. The researcher in Soft Matter Physics, who works at the group of Christos Likos, Professor for Multiscale Computational Physics, has specialized in the self-assembly of materials at the nanoscale and she has published, together with her colleagues, a paper in the journal *Physical Review Letters* on "soft Lego." [\(link\)](#)

17/01/2013 Press releases by *Nanowerk news*:  
**Designing soft, self-assembling, nanoscale Lego** – In developing these novel self-assembling materials, postdoc Barbara Capone has focused on the design of organic and inorganic building blocks, which are robust and can be produced at large scale.  
[\(link\)](#)

- 17/01/2013 Press releases by *R&D Magazine*:  
**Self-assembled “soft Legos” create complex crystal shapes** – Barbara Capone of the Computational Physics Group of the University of Vienna has developed a new method for the construction of building blocks at the nanoscale. ([link](#))
- 17/01/2013 Press releases by *RedOrbit*:  
**New Method Developed For The Construction Of Building Blocks At The Nanoscale** – Barbara Capone of the Computational Physics Group of the University of Vienna has developed a new method for the construction of building blocks at the nanoscale. ([link](#))
- 17/01/2013 Press releases by *EurekAlert*:  
**Soft Lego built in the computer** – In developing these novel self-assembling materials, postdoc Barbara Capone has focused on the design of organic and inorganic building blocks, which are robust and can be produced at large scale. Capone has put forward, together with her colleagues at the Universities of Vienna and Mainz, a completely new pathway for the construction of building blocks at the nanoscale. ([link](#))
- 22/01/2013 Press releases by *Der Standard*:  
**Forscher entwickeln weiche “Legosteine”**
- 17/01/2013 Press releases by *Innovations Report*:  
**Weiche Legosteine am Computer konstruiert** – Barbara Capone von der Gruppe Computergestützte Physik der Universität Wien hat eine neue Methode zur Herstellung von Nanobausteinen entwickelt. ([link](#))
- 17/01/2013 Press releases by *Pressrelations*:  
**Weiche Legosteine am Computer konstruiert** – Barbara Capone von der Gruppe Computergestützte Physik der Universität Wien hat eine neue Methode zur Herstellung von Nanobausteinen entwickelt. ([link](#))
- 17/01/2013 Press releases by *Informationsdienst Wissenschaft*:  
**Weiche Legosteine am Computer konstruiert** – Barbara Capone von der Gruppe Computergestützte Physik der Universität Wien hat eine neue Methode zur Herstellung von Nanobausteinen entwickelt. Die Materialphysikerin, die bei Christos Likos, Professor für Multiscale Computational Physics, zu selbstassemblierenden Materialien im Nanometerbereich forscht, hat zusammen mit KollegInnen einen Beitrag zu “weichen Legosteinen” in der renommierten Fachzeitschrift Physical Review Letters publiziert. ([link](#))
- 17/01/2013 Press releases by *Uni-Online*:  
**Simulationsschnappschuss eines kubischen Kristallgitters aus weichen Di-Block Kopolymer-Sternen.** – Barbara Capone von der Gruppe Computergestützte Physik der Universität Wien hat eine neue Methode zur Herstellung von Nanobausteinen entwickelt. Die Materialphysikerin, die bei Christos Likos, Professor für Multiscale Computational Physics, zu selbstassemblierenden Materialien im Nanometerbereich forscht, hat zusammen mit KollegInnen einen Beitrag zu "weichen Legosteinen" in der renommierten Fachzeitschrift Physical Review Letters publiziert. ([link](#))

---

PRESS RELEASES BY THE UNIVERSITY OF VIENNA:

17/01/2013      **Soft Lego built in the computer** – ([link](#))

17/01/2013      **Weiche Legosteine am Computer konstruiert** – ([link](#))

---

LANGUAGES

Italian : mother tongue

English : excellent (I.E.L.T.S certificate in 2006)

French : excellent

German : basic understanding

Last updated: July 23, 2019



## Statement of Research

Barbara Capone

*Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre,  
Via della Vasca Navale 84, 00146, Roma, Italy*

My research experience spans the areas of **Statistical Mechanics and Soft-Matter** in the fields of Polymer Physics, Nanocomposites, Functionalisable Nanomaterials, Self-Assembly, Arrested Dynamics Behaviours and Tunable Functionalisation at the Nanoscale. The focus of my investigation is set **Nanomaterial Sector**, where I have a solid experience in the development of **Theoretical and Computational Methods** based on **Coarse Grained Multiscale Methodologies** and **Scaling Theories** [1–5], aimed at describing in a quantitative way systems made of **polymers of various architectures** [3, 4, 6–8] and **chemical compositions** [9, 10], and **colloid/polymer mixtures** (nanocomposites)[11–13].

Nowadays nanotechnology is part of our everyday life. It is an interdisciplinary field that broadens together efforts of physicists, material scientists, chemists, biologists, engineers, and it covers a range of materials, mainly characterised by having tunable properties as a function of the size and morphology of their “building blocks” [5]. **My research interest strongly lies in the design of functionalisable materials at the nano-scale.** Starting from the macromolecular scale, I aim at highlighting and then selecting the key parameters able to lead both a **controlled self-assembly process** and the **tunability** of specific properties of the system such as **adsorption/releasing properties**.

Strengthened by a continuous exchange with the experimental counterpart, my focus currently lies in the realisation of **selective nanoparticles aimed at removing targeted contaminants from aqueous solutions** [13–15]. To reach such a goal theoretically and computationally, it is essential to retain a deep knowledge of the properties of material at the nanoscale. At the same time, to be able to scale up the theoretical predictions and to perform large scale simulations, it is essential to develop theoretical tools such as quantitative coarse grainings multiscale methodologies. Within my research path, **I developed a theoretical and computational framework** that allows performing large-scale coarse-grained simulations, with the possibility to **backtrack the results from a theoretical and numerical representation to an experimental one**. This approach renders possible to computationally and theoretically define the critical parameters that will define the “class of generality” of nanoparticles and nanomaterials that have specific predefined properties. The close collaboration and a continuous exchange with experimentalists is then paramount to refine, within such a macro class of material, and highlight which are the possible realisation of the systems.

In collaboration with Dr. Tecla Gasperi, **I recently started a hybrid theoretical/experimental group aimed at designing, realising and testing macromolecules able to selectively load cargo in solution at the nanoscale.** The group currently has 2 PhD students, working on the **theoretical design and experimental realisation of polymeric nanoparticles** of various geometry **able to adsorb selectively pollutants in aqueous solutions**. The work is set at the science department of the Roma Tre University, and strengthened by a network of international collaboration both on the theoretical part with Prof. Remco Tuinier from the Technical University of Eindhoven, and Prof. Ivan Coluzza from CIC biomaGUNE, San Sebastian, Spain, as well as on the experimental side Prof. Erik Reimhult and Dr. Peter van Oostrum from BOKU University in Vienna. **Within such a fruitful collaboration, the first generation of functionalised nano-particles have been already successfully designed and realised, demonstrating the desired ability of selectively loading heavy metal in solutions.** Results have been submitted for publication (see section I A).

**On the applicative ground, I have a keen interest in transferring such know-how in the framework of sustainable water sanitation.** Nanotechnologies can indeed play a key role in such a field, allowing to use local materials even in developing countries (e.g. nanoporous carbon, cellulose, carbon-based nanocomposites) that can all be obtained by local sources such as organic waste.

## I. CURRENT RESEARCH LINES: DESIGNING FUNCTIONALISABLE MATERIAL AT THE NANOSCALE

One of the **main interests** of my research is the **design of functionalisable nano-materials**, starting from the macromolecular scale, selecting the key parameters able to both lead a controlled self-assembly process, and the tunability of specific properties of the system itself **with particular interest on self-assembly and on adsorption/releasing properties**.

In this scenario, **polymer science** appears to be a **very promising field** opening countless possibilities to design and manufacture building blocks that, by means of a specific architecture or chemical composition, **present tunable and controllable properties both at the single molecule level as well as at the mesoscale**. In recent publications [6, 9, 16] I introduced diblock copolymer stars as novel self-assembling building blocks, made of a soft core, decorated by a tunable number of functionalized regions or patches, which serve then as “Soft Lego” for the emergence of larger structures - such as diamond or cubic phases - compatible with the single soft colloids self-organised patchiness. Such a hierarchical self-assembly process is controlled by selecting a few either chemical (pH, solvent quality) or physical (macromolecular structure, temperature, density) parameters.

Being made of a high number of monomeric units, **polymers are moreover eligible systems for** the so-called **superselectivity** [17]; it is in fact possible to obtain a super selectivity on the way functionalized particles are attracted to specific regions on surfaces - or attract specific components - that is linked to the number of different interactions and to the strength of the bonds between nanoparticles and target bonding site: multiple weaker bonds enhance the selectivity since they allow for rearrangement.

By means of a simple theoretical tool, I was able to predict the self-assembly path of Ag-Nano Particles in aqueous solutions in presence of heavy metal ions, and to characterise it [13] and to design polymeric nanoparticles aimed at loading pre-determined cargo in solution, underpinning the importance of the geometry on the choice of the macromolecular adsorber [4, 14, 15]

**My research aims at understanding how to exploit the flexibility and tunability of both polymeric systems of different chemical or topological architecture and nanocomposites, to selectively adsorb and release material in solution.** In particular, I am interested in designing “macromolecules cages” able to recognise and insulate specific target cargos in solutions - e.g. pollutants in water - and to be then able to absorb and release them in a controlled way by tuning a few chemical/physical parameters.

I am assessing this problem from various perspectives at the nanoscale, designing “smart” polymeric systems (see section I A), exploiting properties of targeted nanocomposites (see section I B) or designing molecular filters at the nanoscale (see section II).

### A. Functionalised Polymeric Adsorbers

The framework of functionalisable tunable adsorber is a topic that I am addressing from a wide perspective; as a collaboration with Dr. T. Gasperi, the group of Prof. E. Reimhult of the Institute for Biologically inspired materials of the BOKU university of Vienna and the group of Prof. R. Tuinier at the Technical University of Eindhoven, we are **designing theoretically** [4] and **realising experimentally** [14, 15] **polymeric macromolecules that have the ability of selectively adsorb cargo** that can be controlled enthalpically, entropically and geometrically. The close collaboration with the experimental partners (Dr. T. Gasperi and Prof. E. Reimhult) and with the theoretical one of Prof. R. Tuinier, leading expert in depletion and Self-Consistent Field Theory, will allow to reach a **comprehensive understanding of the adsorption mechanism within polymeric macromolecules**, thus rendering the

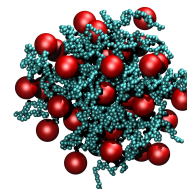


Figure 1. Controlled adsorption of colloids within a star polymer.

whole project tunable and designable.

Starting from the adsorption properties of simple homopolymeric star polymers, see figure Figure 1, **we are designing a set of macromolecular nanobots able to load cargo and recognise heavy metals in complex and crowded solution** (see figure Figure 2) [14, 15] by changing either chemical composition of the geometry of the nanoparticles.

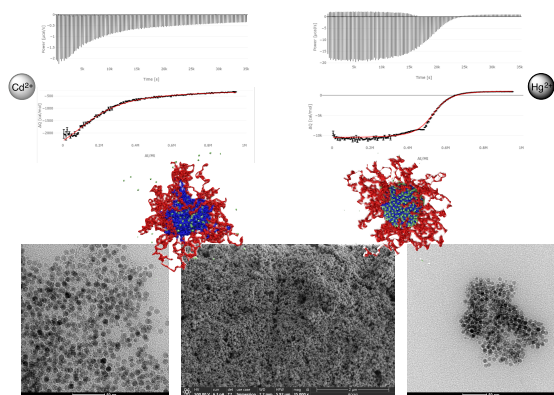


Figure 2. Selective adsorption of  $\text{Cd}^{2+}$  and  $\text{Hg}^{2+}$  within experimental star polymers made of a selective core and a thermosensible shell. The two snapshots show the theoretical predictions for the adsorption process.

The collaboration with the ecotoxicology group of Dr. I. Corsi at the University of Siena is paramount to test for eco-compatibility the emerging material. With the aim of a **comprehensive theoretical understanding** of the main characteristics leading to a **tunable adsorption and release process**, and of developing a set of effective interactions that will allow to design nanomaterials able to **selectively adsorb pollutant of biological nature (such as e.g. antibiotics, hormones)**, I recently started a collaboration with the theoretical group of Prof. F. Polticelli (University of Roma Tre, Italy) and I. Coluzza (CIC biomaGUNE, Spain). Starting from atomistic simulations, it will then be possible to extract sets of effective interactions between diverse macromolecules that will be scaled from the atomistic level up to the mesoscale allowing to explore properties of macromolecular systems in finite density solutions.

Results of the collaboration have been published [4], or submitted to international peer reviewed journals:

- P. Corsi, E. Roma, F. Bruni, T. Gasperi, B. Capone “*Tuning Macromolecular Adsorption Selectivity through Geometry: Bottlebrushes as Super-Selective Adsorbers in Aqueous Solution*” submitted (2019)
- E. Roma, P. Corsi, M. Willinger, B. Capone, R. Zirbs, F. Bruni, E. Reimhult, T. Gasperi, “*Thermoresponsive Star Block-Copolymer grafted on Iron Oxide Nanoparticle for the selective removal of pollutants in Aqueous Solutions*”, submitted (2019)
- P. Corsi, E. Roma, A. Gonzàles Garcia, R. Tuinier, F. Bruni, E. Reimhult, T. Gasperi, B. Capone “*Tunable Thermosensible Star Polymers for Controlled Adsorption in Aqueous Solution*”, submitted (2019)
- P. Corsi, E. Roma, T. Gasperi, F. Bruni, B. Capone “*Exploiting Scaling Laws for Polymeric Bottle Brushes: a Theoretical Coarse-Graining for Homopolymeric Branched Polymers*”, **Physical Chemistry Chemical Physics**, 21, 14873, (2019)

## B. Functionalised Ag Nano Particles

In my research path I developed a hybrid theoretical/computational framework that **allows to perform large scale coarse grained simulations, with the possibility to backtrack the theoretical results to an experimental framework.** This renders possible to computationally and theoretically define the key parameters that will define the “class of generality” of nanoparticles and nanomaterials that have specific predefined properties. A close collaboration and a continuous exchange with experimental groups, allows to refine, within such a macro class of material and highlight, which are the possible realisation of the systems.

In collaboration with the experimental group of Dr. I. Venditti and Prof. C. Battocchio at in the Science Department of the University of Roma Tre and of Prof. P. Proposito at the university of Tor Vergata, we used such an approach to **define a hybrid theoretical / experimental path** aimed at designing optimal ion adsorbers in aqueous solutions.

Making use of theoretical predictions **we are able to underpin the key parameters in the adsorption process.** We could fully characterise the adsorption path of  $\text{Co}^{2+}$  and  $\text{Ni}^{2+}$  [13] in AgNPs. Simulations suggest that cluster size and selective adsorptions can be opportunely tuned acting on a few chemical/physical parameters as sketched in figure Figure 3. Experimental checks of such predictions are currently ongoing at the Elettra SR facility performed by Dr. I. Carlomagno (Elettra, Trieste), Prof. C. Meneghini and Prof. C. Battocchio.

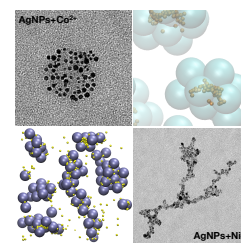


Figure 3. TEM images and computational results obtained for ions/AgNPs binary mixture.

Results of the collaboration have already been published and submitted to international peer reviewed journals:

- P. Corsi, I. Venditti, C. Battocchio, C. Meneghini, F. Bruni, P. Proposito, F. Mochi, B. Capone “*Designing an optimal ion adsorber at the nanoscale: a simple theoretical model for the unusual nucleation of AgNPs /  $\text{Co}^{2+}$  -  $\text{Ni}^{2+}$  binary mixtures*”, **The Journal of Physical Chemistry C**, 123, 6, 3855-3860 (2019)

## II. MOLECULAR FILTERING: GRAPHENE AS A SELECTIVE FILTER FOR WATER DESALINATION AND SANITATION

**On the applicative ground, I have a strong interest in transferring such a know-how in the framework of sustainable water sanitation.** Numerical and laboratory experiments have demonstrated the superior performance of graphene membranes for desalination, but still lack the level of characterisation required to fully unveil the underlying filtration and selectivity mechanism. For such a reason graphene based technology has not yet been transferred from the laboratories up to an industrial framework. The gap between technological demonstration and system development, test and operations is currently impacting industrial investments thus highlighting the urge for the development of innovative high permeability membranes. In collaboration with the **Engineering Department (Dr. P. Prestininzi)** and with the **Architecture Department (Prof. G. Salerno)** of the University of Roma Tre, and with the University of Milano (Prof. G. Porta) and the Politecnico di Torino (Dr. A. Tagliaferri) we started a project aimed at developing a rigorous methodology based on the parallel experimental and theoretical characterisation of the properties of the membranes.

Starting from mesoscale hydraulic and mechanic experiments on graphene membranes, **we aim at unveiling the nanoscale mechanism underlying the water filtration process** through a rigorous recently established

experimental characterisation process. We are currently working on an accurate analysis of scaling, fouling and thermal stability of the membranes.

This research line has been submitted in April 2019 as a research project to the Fondazione Cariplo (Bandi Cariplo 2019 - Bando Economia Circolare, ricerca per un futuro sostenibile)

### III. CONNECTION TO THE RESEARCH LINES OF THE SCIENCE DEPARTMENT AT THE UNIVERSITY OF ROMA TRE

**Within the Science Department at the University of Roma Tre**, I started an interdisciplinary collaboration in the field of the *design of functionalised nanoparticles able to selectively adsorb and release predetermined cargo*.

Such a wide topic sees the collaboration of the groups of Prof. C. Battocchio and Dr. I. Venditti, the one of Dr. T. Gasperi, the one of Prof. F. Polticelli, the one of Prof. M.A. Ricci and A. Sodo, the one of Prof. C. Meneghini and the one of Prof. F. Bruni. All projects also involve diverse national international key partners, as sketched in Figure 4.

**The wide and interdisciplinary collaboration aimed at predicting theoretically and characterise experimentally mesoscale properties of complex nanocomposites made of functionalised nanoparticles** (I. Venditti, C. Battocchio, P. Proposito, F. Bruni, I. Corsi, C. Meneghini), complex macromolecules (T. Gasperi, E. Roma, R. Tuinier, E. Reimhult, F. Bruni, I. Coluzza) or coated micelles (M.A. Ricci, A. Sodo) that able to adsorb or release selectively a specific cargo both in solution.

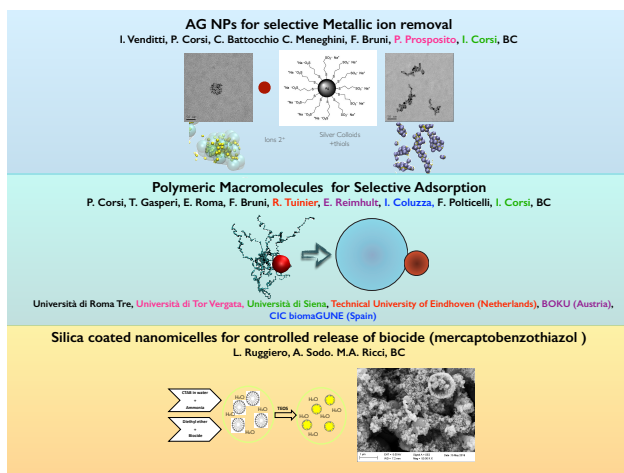


Figure 4. The figures summarises the three main research topics I am focusing on belonging to the general framework of the design of functionalised nanoparticles able to selectively adsorb or release cargo. The interdisciplinary research is highly interconnected within several units of the Science Department at the Roma Tre University at the center of an international collaboration network.

Within the unified framework of functionalised adsorbing/releasing nanoparticles, we thus develop three different yet interconnected research lines, where **differences and similarities between the diverse systems become key ingredients to unveil the key parameters that drive the adsorption/releasing process at the nanoscale**.

#### IV. FUTURE PLANS

The interdisciplinary collaborations both within the University of Roma Tre and with International Research Institutions, open the path for a comprehensive and extensive analysis of the topic of the design of material able to selectively adsorb at the nanoscale.

The three research lines we are currently undertaking within the functionalised nanoparticles framework, are addressing the problem from different perspectives, analysing diverse systems all performing a very similar action. Unveiling the commonalities between the adsorption and release processes in very diverse materials is crucial to highlight the key parameters that drive the whole process at the nanoscale.

Starting from the theoretical macromolecular design and working closely together with experimental groups, I aim at developing a hybrid theoretical/experimental path able to design and realise materials with very specific tunable functionalities. Such materials have a very wide spectra of application, starting from the water filtering processes at the molecular level up to drug delivery.

Over the last years, I was awarded of several international grants, that funded my own research lines. I am currently waiting for the response of an European Training Network (ETN) with a funded PhD position that will work on the properties of topologically constrained polymers, and just submitted a grant at the Cariplo foundation awaiting for a PhD position to work on the graphene membranes topic.

My long term objective is to consolidate my research in the Soft-Matter European scientific community, with particular focus on the design of functionalised particles at the nanoscale. I also have a strong drive towards bringing together my research lines with the concept of Sustainable development, thus applying my know-how in the selective adsorption framework to the more general water sanitation problem.

My own research lines and the wide national and international collaboration on the topic of the design of functionalised nanoparticles for selective adsorption / release will lead to a manifold of possible funding opportunities (ERC Consolidator, FET to be submitted) and scientific directions.

#### KEY NATIONAL AND INTERNATIONAL COOPERATION PARTNERS

- Dr. Tecla Gasperi  
Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre  
Via della Vasca Navale 84, 00146, Roma, Italy  
carlo.meneghini@uniroma3.it
- Prof. Remco Tuinier  
Laboratory of Physical Chemistry  
Department of Chemical Engineering and Chemistry  
Eindhoven University of Technology  
Groene Loper 5, 5612 AE Eindhoven, The Netherlands  
r.tuinier@tue.nl
- Prof. Erik Reimhult  
Institute of Biologisch inspirierte Materialien  
Muthgasse 11  
1190 Wien  
erik.reimhult@boku.ac.at

- Dr. P. van Oostrum  
Institute of Biologisch inspirierte Materialien  
Muthgasse 11  
1190 Wien  
peter.van.oostrum@boku.ac.at
  
- Prof. Ivan Coluzza  
CIC biomaGUNE Parque Científico y Tecnológico de Gipuzkoa.  
Paseo Miraman 182,  
20014 Donostia / San Sebastian, Gipuzkoa. Spain.  
icoluzza@cicbiomagune.es
  
- Dr. Iole Venditti  
Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre  
Via della Vasca Navale 84, 00146, Roma, Italy  
mariaantonietta.ricci@uniroma3.it
  
- Prof. Carlo Meneghini  
Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre  
Via della Vasca Navale 84, 00146, Roma, Italy  
carlo.meneghini@uniroma3.it
  
- Prof. Fabio Bruni  
Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre  
Via della Vasca Navale 84, 00146, Roma, Italy  
fabio.bruni@uniroma3.it
  
- Prof. Maria Antonietta Ricci  
Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre  
Via della Vasca Navale 84, 00146, Roma, Italy  
mariaantonietta.ricci@uniroma3.it
  
- Prof. Chiara Battocchio  
Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre  
Via della Vasca Navale 84, 00146, Roma, Italy  
fabio.bruni@uniroma3.it
  
- Prof. Christos N. Likos  
Computational Physics, University of Vienna  
Sensengasse 8-15, 1090 Vienna, Austria  
christos.likos@univie.ac.at

- Prof. Christoph Dellago  
Computational Physics, University of Vienna  
Boltzmgasse 5, 1090 Vienna, Austria  
christoph.dellago@univie.ac.at
- Prof. Jean-Pierre Hansen  
Department of Chemistry, Lensfield Road,  
Cambridge, CB2 1EW, UK  
jph32@cam.ac.uk

- 
- [1] C. Pierleoni, B. Capone, and J.-P. Hansen, *J. Chem. Phys.* **127**, 171102 (2007).
  - [2] B. Capone, C. Pierleoni, J.-P. Hansen, and V. Krakoviack, *J. Phys. Chem. B* **113**, 3629 (2009).
  - [3] B. Capone, J.-P. Hansen, and I. Coluzza, *Soft Matter* **6**, 6075 (2010).
  - [4] P. Corsi, E. Roma, T. Gasperi, F. Bruni, and B. Capone, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 14873 (2019).
  - [5] E. Bianchi, B. Capone, I. Coluzza, L. Rovigatti, and P. D. J. van Oostrum, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 19847 (2017).
  - [6] B. Capone, I. Coluzza, F. Lo Verso, C. N. Likos, and R. Blaak, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 238301 (2012).
  - [7] A. Narros, C. N. Likos, A. Moreno, and B. Capone, *Soft Matter* **10**, 9601 (2014).
  - [8] I. Coluzza, B. Capone, and J.-P. Hansen, *Soft Matter* **7**, 5255 (2011).
  - [9] L. Rovigatti, B. Capone, and C. N. Likos, *Nanoscale* **8**, 3288 (2016).
  - [10] I. Coluzza, P. van Oostrum, B. Capone, and D. C., *Phys. Rev. Lett* **110**, 075501 (2013).
  - [11] D. Truzzolillo, D. Marzi, J. Marakis, B. Capone, M. Camargo, A. Munam, M. Gauthier, C. N. Likos, and D. Vlassopoulos, *Phys. Rev. Lett* **111**, 208301 (2013).
  - [12] T. A. Grünwald, A. Lassenberger, R. Zirbs, B. Capone, P. van Oostrum, I. Vonderhaid, H. Lichtenegger, and E. Reimhult, *Chem. Mater.* **27**, 4763 (2015).
  - [13] P. Corsi, I. Venditti, C. Battocchio, C. Meneghini, F. Bruni, P. Proposito, F. Mochi, and B. Capone, *The Journal of Physical Chemistry C* **123**, 3855 (2019).
  - [14] P. Corsi, E. Roma, A. Gonzàles Garcia, R. Tuinier, F. Bruni, E. Reimhult, T. Gasperi, and B. Capone, submitted (2019).
  - [15] E. Roma, P. Corsi, B. Capone, M. Willinger, R. Zirbs, F. Bruni, E. Reimhult, and T. Gasperi, submitted (2019).
  - [16] B. Capone, I. Coluzza, F. G. L. Verso, R. Blaak, and C. N. Likos, *New. J. Phys.* **15**, 095002 (2013).
  - [17] F. J. Martinez-Veracoechea and D. Frenkel, *PNAS*, 1105351108 (2011).



# **CURRICULUM DELL'ATTIVITA' SCIENTIFICA E DIDATTICA**

**(redatto ai sensi degli Artt. 46 e 47 del D.P.R. 28.12.2000, n. 445)**

Il sottoscritto Roberto Di Candia, nato a Manfredonia (FG) il 24/10/1986, residente in Manfredonia (FG) via Italo Calvino 4,

consapevole, ai sensi dell'art. 76 del D.P.R. 445/2000, che dichiarazioni mendaci, formazione o uso di atti falsi sono puniti ai sensi del codice penale e delle leggi speciali in materia,

## **DICHIARA**

le informazioni descritte in seguito, corrispondenti ai paragrafi: Formazione, Contratti di Ricerca e Borse, Visite in gruppi di ricerca, Premi e Grant, Esperienze Didattiche, Tesi MA/BA, Partecipazioni a commissioni di dottorato, Contributi a conferenze, Elenco pubblicazioni, Lingue.

---

## Formazione

- Luglio 2015 **PhD Fisica Teorica**, UNIVERSITÁ DEI PAESI BASCHI UPV/EHU, Bilbao (Spagna).  
Summa cum laude (Distinction).  
*Thesis*: Embedding quantum simulators.  
*Research Area*: Tecnologie quantistiche.  
*Advisor*: Prof. Enrique Solano.
- Luglio 2011 **MSc Fisica Teorica**, UNIVERSITÁ DI PISA, Italia.  
110/110.  
*Thesis*: Quantum tomography via compressed sensing.  
*Advisor*: Dr. John Calsamiglia (UAB, Barcelona (Spagna))
- Luglio 2008 **BSc Scienze Fisiche**, UNIVERSITÁ DI PISA, Italia.  
110/110 cum laude.

---

## Contratti di Ricerca e Borse

- Lug 19 – Presente **Postdoctoral Researcher**, AALTO UNIVERSITY, Espoo (Finlandia).  
Dipartimento di ingegneria delle comunicazioni. (gruppo del Prof. Riku J ntti)  
Backscatter communication nel regime microonde
- Mag 17 – Apr 19 **Humboldt Postdoctoral Fellow**, UNIVERSIT  FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Dipartimento di Fisica Teorica. (gruppo del Prof. Jens Eisert)  
Simulazioni quantistiche e fisica dei sistemi quantistici a multi corpi, progetto RaQuS
- Mag 16 – Apr 17 **Postdoctoral Researcher**, UNIVERSIT  FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Department of Theoretical Physics. (gruppo del Prof. Jens Eisert)  
Simulazioni quantistiche e fisica dei sistemi quantistici a multi corpi, Progetto EU AQUs
- Set 14 – Ago 15 **PhD Researcher**, UNIVERSIT  DEI PAESI BASCHI UPV/EHU, Bilbao (Spagna).  
Dipartimento di Fisica-Chimica. (gruppo del Prof. Enrique Solano)  
Simulazioni quantistiche e comunicazione quantistica nel regime microonde, Progetto EU SCALEQIT
- Ago 11 – Ago 14 **Marie Curie ESR Fellow**, UNIVERSIT  DEI PAESI BASCHI UPV/EHU, Bilbao (Spagna).  
Dipartimento di Fisica-Chimica. (gruppo del Prof. Enrique Solano)  
Simulazioni quantistiche e comunicazione quantistica nel regime microonde, Progetto CCQED EU ITN MCP

---

## Visite in gruppi ricerca

- Set 2015 - Apr 2016 **Universit  dei Paesi Baschi UPV/EHU**, GRUPPO DEL PROF. ENRIQUE SOLANO, Bilbao (Spagna).  
Collaborazione su comunicazione quantistica nel regime delle microonde e simulazioni quantistiche
- Nov 2014 - Mar 2015 **Walther Me  ner Institute**, GRUPPO DEL DR. FRANK DEPPE, Garching (Germania).  
Collaborazione su comunicazione quantistica nel regime delle microonde

---

## Premi e Grant

- 2016 **Humboldt Fellowship**, UNIVERSIT  FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Fellowship di due anni con revisione paritaria, con un progetto su simulazioni quantistiche e fisica quantistica a multi corpi. Valore 82800 euro

---

## Esperienze Didattiche

- 2017-2018 **Tutor**, UNIVERSITÄ FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Meccanica quantistica avanzata
- 2016-2017 **Tutor**, UNIVERSITÄ FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Meccanica quantistica avanzata + lezione di 2h

---

## Tesi MA/BA

- Agosto 2018 **Philip Zienkiewicz - Tesi Bachelor**, UNIVERSITÄ FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Certifying quantum simulation of many-body systems

---

## Partecipazione a commissioni di dottorato

- Novembre 2018 **Robert Schulz**, UNIVERSITÄ FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Multi-scale diffusion processes: from hydrogen bonds to human skin
- Marzo 2018 **Federico Guerra**, UNIVERSITÄ FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Dynamic hydrogen-bonded networks of photosystem II
- Novembre 2017 **Stefan Milenkovic**, UNIVERSITÄ FREIE DI BERLINO, Berlino (Germania).  
Hydrogen bonding and conformational coupling of SecA protein motor

---

## Contributi a conferenze

- 4-9 Mar 2018 **talk**, DPG QUANTUM OPTICS, Erlangen (Germania).  
Quantum backscatter communication
- 12-19 Set 2017 **talk**, ITALIAN QUANTUM INFORMATION SCIENCE CONFERENCE, Firenze (Italia).  
Quantum backscatter communication
- 29-31 Ott 2014 **talk**, CCQED FINAL MEETING, Aarhus (Danimarca).  
Microwave quantum communication
- 25-27 Giu 2014 **talk**, ICE-1, Saragozza (Spagna).  
Embedding quantum simulator
- 23-29 Mar 2014 **Organizzatore e invited talk**, CCQED YES MEETING, Landeck (Austria).  
Embedding quantum simulator
- 3-7 Mar 2014 **talk**, MARCH MEETING, Denver (USA).  
Embedding quantum simulator
- 11-15 Nov 2013 **talk**, QUANTUM SIMULATIONS AND QUANTUM WALKS, Pisa (Italia).  
Embedding quantum simulator
- 29 Set- 4 Ott 2013 **Poster**, QUANTUM SIMULATIONS WORKSHOP, Benasque (Spagna).  
Embedding quantum simulator
- 9-13 Set 2013 **talk**, CONFERENCE ON RESONATOR QED, Monaco (Germania).  
Embedding quantum simulator
- 2-7 Giu 2013 **Poster**, CCQED YES MEETING, Zurigo (Svizzera).  
Microwave quantum teleportation
- 22-25 Ott 2012 **Poster**, WORKSHOP ON QUANTUM SIMULATIONS, Bilbao (Spagna).  
Dual-path methods for quantum tomography

10-14 Set 2012 **Poster**, NATIONAL INSTRUMENTS SUMMER SCHOOL, Monaco (Germania).

Dual-path methods for quantum tomography

2-6 Lug 2012 **Contributed talk**, CENTRAL EUROPEAN WORKSHOP ON QUANTUM OPTICS, Sinaia (Romania).

Dual-path methods for quantum tomography

26 Feb-2 Mar 2012 **Poster**, CCQED WINTER SCHOOL, Les Houches (Francia).

Dual-path methods for quantum tomography

---

## Elenco Pubblicazioni

Citazioni Google Scholar: h-index 12 con 446 citations. Scopus: h-index 10 con 292 citazioni. ISI: h-index 11 con 275 citazioni.

- Articoli referati
- Quantum backscatter communication: a new paradigm, R. Di Candia et al., *ISWCS Conference*, IEEE (2018).
  - Finite-time quantum entanglement in propagating squeezed microwaves, K. G. Fedorov et al. *Scientific Reports* 8, 6416 (2018).
  - Quantum illumination reveals phase-shift induced cloaking, *Scientific Reports* 7, 9333 (2018).
  - Multiantenna quantum backscatter communications, R. Jantti et al., *Globecom Workshop*, IEEE 1-6 (2017).
  - Quantum estimation methods for quantum illumination, M. Sanz et al., *Physical Review Letters* 118, 070803 (2017).
  - Algorithmic quantum simulation of memory effects, U. Alvarez-Rodriguez et al., *Physical Review A* 95, 020301 (2017).
  - Displacement of propagating squeezed microwave states, K. G. Fedorov et al., *Physical Review Letters* 117, 020502 (2016).
  - Entanglement classification with matrix product states, M. Sanz et al., *Scientific Reports* 6, 30188 (2016).
  - Measuring entanglement in a photonic embedding quantum simulator, J. C. Loredó et al., *Physical Review Letters* 116, 070503 (2016).
  - Quantum teleportation of propagating quantum microwaves, R. Di Candia et al. *EPJ Quantum Technology* 2 (1), 1-17 (2015).
  - Quantum simulation of dissipative processes without reservoir engineering, R. Di Candia et al., *Scientific Reports* 5, 9981 (2015).
  - Entanglement measures in ion-trap quantum simulators without full-tomography, J. S. Pedernales et al., *Physical Review A* 90, 012327 (2014).
  - Efficient quantum algorithm for computing n-time correlation function, J. S. Pedernales et al., *Physical Review Letters* 113, 020404 (2014).
  - Dual-path methods for propagating quantum microwaves, R. Di Candia et al., *New Journal of Physics* 16, 015001 (2014).
  - Embedding quantum simulators for quantum computation of entanglement, R. Di Candia et al., *Physical Review Letters* 111, 240502 (2013).
  - Squeezing with a flux-driven Josephson parametric amplifier, L. Zhong et al., *New Journal of Physics* 15, 125013 (2013).
  - Relativistic quantum physics in circuit QED, J. S. Pedernales et al., *New Journal of Physics* 15, 055008 (2013).
  - Path entanglement of continuous-variable quantum microwaves, E. P. Menzel et al., *Physical Review Letters* 109, 250502 (2012).

- in preparazione
- Classical simulation of Ising and many-body localized quantum simulators, R. Di Candia et al.
  - Ambient backscatter communication in the microwave length, R. Di Candia et al.

---

## Lingue

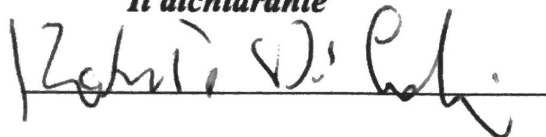
Italian **Madrelingua**

English	<b>Esperto</b>
Spanish	<b>Esperto</b>
German	<b>Basico</b>

Il sottoscritto dichiara di essere informato, ai sensi del decreto legislativo 196/2003, che i dati sopra riportati verranno utilizzati nell'ambito del procedimento per il quale la presente dichiarazione viene resa.

Catania, 17.07.2015

*Il dichiarante*

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Zehra D. Pahi', is written over a horizontal line.

## INFORMAZIONI PERSONALI

Fisicaro Giuseppe



## OCCUPAZIONE PER LA QUALE SI CONCORRE

Ricercatore in Fisica

## ESPERIENZA PROFESSIONALE

5 Set. 18–alla data attuale

### Ricercatore Post-doc

CNR-IMM

Z.I. VIII strada, 5, 95121 Catania (Italia)

<https://hq.imm.cnr.it>

Attività di ricerca all'interno del progetto europeo H2020 "CHALLENGE" - 3C-SiC Hetero-epitaxially grown on silicon compliant substrates and 3C-SiC substrates for sustainable wide-band-Gap power devices. Multiscale modeling, calcoli ab-initio density functional theory (DFT) e dinamica molecolare (MD), simulazioni Monte Carlo Cinetico (KMC) per materiali e nanosistemi di carburo di silicio (SiC).

Ab-initio structure predictions e metodologie di struttura elettronica a primi principi (DFT, DFTB + e MD) per lo studio di vari sistemi di interesse nella scienza dei materiali. Studio di materiali perovskiti per applicazioni fotovoltaiche. Superfici di TiO<sub>2</sub> e cluster per water splitting. Sviluppo di modelli impliciti di solvatazione per calcoli ab-initio. Estensione completa della suite BigDFT a celle non ortorombiche.

Conoscenza e sviluppo di vari approcci teorici/computazionali applicabili a fenomeni dinamici e termodinamici della materia in tutti gli stati di aggregazione: first principle ab-initio DFT, ab-initio e Car-Parrinello MD, structure predictions, sviluppo codici DFT, Monte Carlo Cinetico, risolutori numerici alle differenze finite, partial differential equation modelling, modelling al continuo. Studio della propagazione e interazione dei fotoni con i campi e con la materia durante processi laser. Sviluppo di metodi matematici e numerici finalizzati alla soluzione delle equazioni di Poisson e Poisson-Boltzmann. Ricerca teorica/computazionale nei campi della fisica atomica e molecolare, degli stati liquidi e solidi, degli stati diluiti e dei plasmi.

Attività o settore Ricerca scientifica

17 Mar. 14–31 Ago. 18

### Ricercatore Post-doc

Department of Physics - University of Basel

Klingelbergstrasse 82, 4056 Basel (Svizzera)

<https://comphys.unibas.ch/>

Attività all'interno del progetto svizzero PASC "ENVIRON: A Library for Complex Electrostatic Environments in Electronic-structure Simulations" presso Department of Physics, University of Basel all'interno del gruppo di ricerca del Prof. Dr. Stefan Goedecker. Il progetto era in collaborazione con il Prof. Dr. Nicola Marzari Theory and Simulation of Materials Institute of Materials EPFL, Lausanne ed il Prof. Dr. Juerg Hutter Physics Department University of Zurich.

Abbiamo sviluppato una libreria elettrochimica che estende i codici di struttura elettronica a primi principi DFT ad ambienti liquidi complessi. La libreria è in grado di risolvere sia l'equazione generalizzata di Poisson che quella di Poisson-Boltzmann, consentendo di gestire soluzioni neutre ed ioniche implicitamente nei calcoli DFT. Abbiamo sviluppato, parametrizzato e testato un modello implicito di solvatazione chiamato "soft-sphere".

Ab-initio structure predictions e metodologie di struttura elettronica a primi principi (DFT, DFTB + e

MD) per lo studio di vari sistemi di interesse nella scienza dei materiali. Studio di materiali perovskiti per applicazioni fotovoltaiche. Superfici di TiO<sub>2</sub> e cluster per water splitting. Sviluppo di modelli impliciti di solvatazione per calcoli ab-initio. Estensione completa della suite BigDFT a celle non ortorombiche.

Assistente per diversi corsi di fisica computazionale e calcoli della struttura elettronica DFT.

**Attività o settore** Ricerca scientifica

17 Feb. 14–16 Mar. 14

### Ricercatore Post-doc

CNR-IMM

Z.I. VIII strada, 5, 95121 Catania (Italia)

<https://hq.imm.cnr.it>

Simulazione dell'evoluzione del sistema difetti/drogante in processi di laser annealing, sia in fase solida che nella fase liquida del silicio parzialmente fuso.

Simulazione dell'evoluzione di profili di attacco e deposizione in processi di plasma etching. Sviluppo di codici Monte Carlo Cinetico e modelli fisici basati su fenomeni di superficie (attacco, assorbimento, crescita epitassiale, ecc.).

Studio di intrappolamento e assorbimento della luce in celle solari mediante codici sviluppati in ambiente MATLAB.

Sviluppo e implementazione di metodi di simulazione per dispositivi dielettroforetici. Sviluppo di un simulatore di Monte Carlo - Poisson tridimensionale per sistemi colloidali. Utilizzo della piattaforma Comsol.

**Attività o settore** Ricerca scientifica

13 Ott. 12–Dic. 13

### Ricercatore Post-doc

CNR-IMM

Z.I. VIII strada, 5, 95121 Catania (Italia)

<https://hq.imm.cnr.it>

Grant N° BS. IMM006/2012/CT, Prot. N° 0003890 23/07/2012 published on Italian G.U. N° 60 the 03/08/2012 "Formazione di esperti per la Progettazione, Realizzazione e Caratterizzazione di celle solari e sistemi concentratori" (PON01\_01725).

Simulazione dell'evoluzione del sistema difetti/drogante in processi di laser annealing, sia in fase solida che nella fase liquida del silicio parzialmente fuso.

Simulazione dell'evoluzione di profili di attacco e deposizione in processi di plasma etching. Sviluppo di codici KMC e modelli fisici basati su fenomeni di superficie (attacco, assorbimento, crescita epitassiale, ecc.).

Studio di intrappolamento e assorbimento della luce in celle solari mediante codici sviluppati in ambiente MATLAB.

Sviluppo e implementazione di metodi di simulazione per dispositivi dielettroforetici. Sviluppo di un simulatore di Monte-Carlo-Poisson tridimensionale per un sistema colloidale. Utilizzo della piattaforma Comsol.

**Attività o settore** Ricerca Scientifica

15 Gen. 12–12 Ott. 12

### Ricercatore Post-doc

CNR-IMM

Z.I. VIII strada, 5, 95121 Catania (Italia)

<https://hq.imm.cnr.it>

Grant N° BS IMM005/2011/CT prot. n. 0000106 12-01-2012 inside the European research project "Advanced Technology Modeling for Extra-Functionality Devices – Enlarged EU ATEMox Grant Agreement N° 287669".

Studio della cinetica del sistema drogante/difetti indotta dall'irraggiamento laser mediante simulazioni Monte Carlo e modellazione al continuo. Studio dell'evoluzione dei difetti e dell'attivazione del drogante nei substrati impiantati di silicio durante i processi di laser annealing. Studio degli effetti dello stress indotti dall'irradiazione laser. Sviluppo da zero dei codici KMC e dei modelli al continuo.

Pianificazione e coordinamento di esperimenti e redazione di relazioni tecniche e pubblicazioni periodiche. Partecipazione al progetto ATEMox (Advanced Technology Modelling for Extra-Functionality Devices), in collaborazione con diversi partners europei.



## Attività o settore Ricerca Scientifica

1 Feb. 11–31 Mag. 11

## Visiting PhD student

Department of electronics, University of Valladolid, Valladolid (Spagna)

Quattro mesi trascorsi come visiting PhD student presso il dipartimento di elettronica dell'Università di Valladolid (Spagna) sotto la supervisione della Prof.ssa Lourdes Pelaz. La collaborazione si è concentrata sulla caratterizzazione teorica del sistema di difetti/drogante nel silicio impiantato. Sviluppo, implementazione e calibrazione di un modello alle equazioni differenziali parziali. Uso del codice SRIM basato sull'approssimazione delle collisioni binarie. Implementazione e calibrazione da zero di un codice Monte Carlo Cinetico per processi laser annealing.

1 Gen. 08–28 Feb. 14

## Direttore Orchestra di Fiati

Associazione Musicale "V. Bellini", Buccheri (Sr) (Italia)

Ho ricoperto la carica di direttore d'orchestra e direttore musicale dell'orchestra di fiati "V. Bellini" di Buccheri (Sr., Italia). Nello stesso periodo ho lavorato come insegnante di trombone e ottoni nella stessa istituzione.

## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

10 Mag. 19–alla data attuale

## Abilitazione Scientifica Nazionale

Abilitazione Scientifica Nazionale - SETTORE CONCORSUALE 02/B2 FISICA TEORICA DELLA MATERIA. Valida dal 10/05/2019 al 10/05/2025 (art. 16, comma 1, Legge 240/10) per le funzioni di Professore Universitario di seconda fascia.

1 Nov. 08–31 Ott. 11

## Dottorato di ricerca in Fisica

Università di Catania - Dipartimento di Fisica e Astronomia, Catania (Italia)

Viva voce defence il 01/02/2012.

Titolo tesi: "Micro-structural modifications of semiconductor systems under irradiation: experiment, modeling and simulation analysis". Supervisori: Prof. G Piccitto (Department of Physics, University of Catania) e Dr. A. La Magna (CNR-IMM Catania).

Ricerca sulle modifiche microstrutturali dei sistemi a semiconduttore durante i processi di Laser Annealing. Cinetica post-impianto del sistema drogante/difetti. Simulazione di dispositivi MOS basati su SiGe e Ge. Sviluppo di un codice di simulazione al continuo che simula l'interazione tra la luce laser e la struttura periodica del transistor.

1 Gen. 13–18 Dic. 13

## Qualifica per l'insegnamento nelle scuole secondarie - Matematica e Fisica

Università di Catania, Catania (Italia)

Abilitazione all'insegnamento nelle scuole secondarie di secondo grado Matematica e Fisica, Classe A027 ottenuta dopo aver superato una selezione pubblica e un corso universitario di un anno (Tirocinio Formativo Attivo - TFA).

1 Ott. 00–14 Lug. 08

## Laurea Magistrale in Fisica (V.O.)

Dipartimento di Fisica e Astronomia - Università di Catania, Catania (Italia)

Specializzazione in fisica della materia condensata, fisica dei semiconduttori, fisica teorica e computazionale. Tesi "Evoluzione dei sistemi di impurità-difetto nel silicio sotto irradiazione laser": Prof. G Piccitto (Dipartimento di Fisica, Università di Catania) e Dr. A. La Magna (CNR-IMM Catania).

1 Ott. 94–1 Ott. 00

## Laurea Magistrale in discipline Musicali - Trombone

Istituto Musicale Pareggiato "V. Bellini", Catania (Italia)

## COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre italiano

Lingue straniere

	COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
	Ascolto	Lettura	Interazione	Produzione orale	
inglese	B2	B2	C1	B2	B2
tedesco	A2	A2	A2	A2	A2

Livelli: A1 e A2: Utente base - B1 e B2: Utente autonomo - C1 e C2: Utente avanzato  
 Quadro Comune Europeo di Riferimento delle Lingue

Competenze comunicative

Buone capacità comunicative acquisite attraverso la mia esperienza di ricercatore post-doc. Ottime capacità di contatto acquisite grazie alla mia esperienza di ricercatore post-doc, insegnante di musica e direttore d'orchestra.

Competenze organizzative e gestionali

Buone capacità organizzative e di leadership come presidente, direttore musicale e direttore d'orchestra all'interno dell'Associazione Musicale "V. Bellini" di Buccheri, Siracusa (Italia). Responsabile di un'orchestra di 35 persone dal gennaio 2004 ad oggi.

Competenze professionali

Considerando la particolarità del mio campo di ricerca che riguarda l'analisi teorica della fisica della materia condensata mediante simulazioni e modellizzazione, il mio atteggiamento e le mie capacità principali si concentrano sulla scrittura e sullo sviluppo di codici e modelli. In particolare il lavoro di programmazione è il mio preferito.

Conoscenza e sviluppo di vari approcci teorici/computazionali applicabili a fenomeni dinamici e termodinamici della materia in tutti gli stati di aggregazione: first principle ab-initio DFT, ab-initio e Car-Parrinello MD, structure predictions, sviluppo codici DFT, Monte Carlo Cinetico, risolutori numerici alle differenze finite, partial differential equation modelling, modelling al continuo. Studio della propagazione e interazione dei fotoni con i campi e con la materia durante processi laser. Sviluppo di metodi matematici e numerici finalizzati alla soluzione delle equazioni di Poisson e Poisson-Boltzmann. Ricerca teorica/computazionale nei campi della fisica atomica e molecolare, degli stati liquidi e solidi, degli stati diluiti e dei plasmi.

Inoltre, le mie capacità riguardano insegnare o spiegare in dettaglio a individui e gruppi, condividere o comunicare bene nel parlare e scrivere con individui e gruppi, aiutare le persone a fare rete o entrare in contatto, condurre, dirigere o presiedere una discussione con gruppi, mediare tra le parti aiutando a risolvere eventuali controversie, formulare o proporre idee o concetti originali.

Stesura di relazioni scientifiche e tecniche o pubblicazioni regolari in inglese. Sono autore di quaranta pubblicazioni pubblicate in diverse riviste internazionali (JCR).

Tra loro Nano Letters, Physical Review Letters, Physical Review Materials, Scientific Report, Journal of Chemical Theory and Computation, Journal of Chemical Physics, Physical Review E, Applied Physics Letters, Applied Physics Express, Journal of Applied Physics, etc.

Ho presentato i miei lavori di ricerca come presentazioni orali in diverse conferenze internazionali (APS March Meeting, Psi-k Conference, CECAM workshop, E-MRS Spring Meeting, SISPAD, LMP Conference, IIT held in France, Spain, Japan and United States).

Competenze digitali

Tutte le attività scientifiche hanno richiesto un uso intensivo del computer e vari software. In particolare, la teoria della funzionalità della densità DFT e i codici KMC sono stati sviluppati nel linguaggio Fortran. Il codice per il light trapping in un ambiente MATLAB. Tutti i modelli al continuum sono stati implementati all'interno del software Comsol. Durante il mio master e il mio dottorato ho frequentato diversi corsi di linguaggi di programmazione Fortran, C e C ++.

Ottima conoscenza del linguaggio Fortran. Notebook Python e Jupyter per l'analisi dei dati. Ottima conoscenza del software Comsol e Matlab. Buona conoscenza del linguaggio di programmazione C e C ++. Ottima conoscenza del linguaggio Latex e del pacchetto Word, per scrivere regolarmente report e pubblicazioni. Uso avanzato del sistema operativo Microsoft Windows. Ottima conoscenza di Microsoft Office. Ottima conoscenza dei programmi Montecarlo per la simulazione di impianti ionici (pacchetto SRIM). Ottima conoscenza dei programmi di analisi dei dati (Origin pro).

## ULTERIORI INFORMAZIONI

Progetti

Supporting research tasks of the European Project H2020 "CHALLENGE" - 3C-SiC Hetero-

epitaxially grown on silicon compliant substrates and 3C-SiC substrates for sustainable wide-band-gap power devices GRANT AGREEMENT N. 720827 – CUP: B66J16001480006. Ab-initio density functional theory calculations together with Monte Carlo simulations for silicon-carbide materials and nanosystems.

**Progetti** Swiss PASC project "ENVIRON:A Library for Complex Electrostatic Environments in Electronic-structure Simulations".

The computational study of chemical reactions in complex, wet environments is critical for applications in many fields, and of cross-disciplinary interest to physics, chemistry, materials science, chemical engineering, and biology. Driven by very recent advances and developments in this field, we propose to develop and distribute an open-source library of verified and validated electrochemical and solvation modules, able to run efficiently on advanced computing architectures, and interface it with some of the core electronic-structure codes developed or co-developed in Switzerland - namely ABINIT, BigDFT, CP2K, and Quantum ESPRESSO. Given its documented and open-source nature, it is also expected that such tool will become of wide use outside these communities, and be adopted by other public or distributed codes. The core objective of this library will be to describe complex electrostatic environments where an explicit solvent becomes implicit, with a position-dependent dielectric constant, or where mobile ions can shield the charge or multipoles of the system of interest; it will embed the quantum simulation engines into a robust and efficient Poisson-Boltzmann solver that has been extensively verified and validated.

**Progetti** Swiss NCCR MARVEL project (<http://nccr-marvel.ch>). Centre on Computational Design and Discovery of Novel Materials, that has been created by the Swiss National Science Foundation in May 2014. The goal of the NCCR MARVEL is to radically transform and accelerate invention and discovery in science and technology, and especially to transform and accelerate the design and discovery of novel materials in order to achieve improved properties and performance, or to witness the emergence of original physical properties. We will achieve this goal by exploiting the predictive accuracy that quantum-mechanical simulations have now reached for realistic, complex systems, the treasure trove of ever-increasing computational power ideally suited to intrinsically parallel problems, and the powerful synergies arising with the computer science of heterogeneous data management, data mining, and machine learning. EPFL acts as the leading house, and it is directed by Nicola Marzari, but it involves 41 principal investigators across 12 Swiss Institutions: the two Federal Institutes of Technology in Lausanne and Zurich (EPFL and ETHZ), six universities in Basel, Bern, Fribourg, Geneva, Svizzera Italiana, and Zurich (UNIBAS, UNIBE, UNIFR, UNIGE, USI, UZH), the Swiss National Supercomputing Centre (CSCS), the research laboratories of IBM Zurich, the two federal research institutes, the Paul Scherrer Institute (PSI), and the Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology (Empa). The applicant integrated his research in Basel to the various work-packages of the Marvel project.

**Progetti** The study of defects evolution and dopant activation in silicon implanted substrates during thermal laser annealing processes by means of kinetic Monte Carlo simulations and continuum modeling as well as the study of stress effect induced by laser irradiation were carried out inside the European Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under the grant agreement n. 258547 ATEMOM (Advanced Technology Modeling for Extra-Functionality Devices), in collaboration with several European partners.

FRENDTECH and ATOMICS with major contributions by the current partners, process simulation has been brought to a state which allows in industrial environments a sufficiently accurate simulation of doping profiles in advanced CMOS technologies. Important electrical characteristics of core CMOS devices can now be predicted from scratch or with a minimum calibration effort. However, concepts towards low-power electronics, smart power applications, CMOS image sensors, and CMOS derivatives providing extra functionalities are still not sufficiently supported by TCAD. This concerns especially the prediction of leakage currents in such or parasitic devices caused by electrically active defects that remain after processing, and alternative doping techniques like plasma immersion ion implantation, low-temperature implantation, diversified cocktail implants and laser annealing which are considered for low-leakage ultra shallow junctions. The lack of suitable models that can be used in the early stages of industrial R&D inhibits the necessary cost reduction in the development of devices for which Europe is still at the forefront. Funded within the ICT theme of the Seventh Framework Programme of the EC, the ATEMOM project develops the full set of missing models and implements and includes them into the Sentaurus TCAD platform of Synopsys so that they are of immediate value to the European semiconductor industry. The integrated models have been finally evaluated by STMicroelectronics with respect to industrial needs. To reach these ambitious goals, a consortium of European companies active in complementary fields of competence (STMicroelectronics: device

manufacturing, Synopsys: TCAD software, Exico, IBS: equipment production, Probion, Semilab: characterization) and leading European research institutes (CNRS-LAAS/CEMES, CNR-IMM, ETH-Zurich, Fraunhofer-IISB, Univ. Newcastle) has been formed which, together, is well prepared to expertly cover all fields from experiment via characterization and modelling to simulation.

<http://www.atemox.eu/>

# CURRICULUM SCIENTIFICO

## Fisicaro Giuseppe

Il curriculum scientifico del candidato è documentato dall'elenco delle pubblicazioni su riviste internazionali (JCR), tutte sottoposte a processi di revisione tra pari. Il candidato ha pubblicato 38 articoli (27 dopo il dottorato, 11 prima del dottorato, la maggior parte di loro come primo autore), ha partecipato a 31 conferenze (21 dopo il dottorato, 10 prima del dottorato) e ha tenuto 5 seminari presso diverse istituzioni.

Ha conseguito il titolo di dottore di ricerca in Fisica con lode presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Catania in collaborazione con il CNR-IMM di Catania il 01-02-2012 (viva voce defense). Il titolo della tesi era "Micro-structural modifications of semiconductor systems under irradiation: experiment, modeling and simulation analysis", sotto la supervisione del Prof. Dr. G. Piccitto e il Dr. A. La Magna. Durante il suo periodo di dottorato, il candidato ha rafforzato le sue capacità di programmazione e di simulazione. Ha sviluppato un codice Monte Carlo cinetico atomistico per l'evoluzione dei difetti e del drogante durante processi di laser annealing e un metodo accoppiato Monte Carlo-Poisson per la simulazione di effetti particella-particella in dispositivi dielettroforetici. Queste indagini atomistiche sono state ampiamente integrate con approcci al continuo, sviluppando modelli di diffusione-reazione per il processo di evoluzione dei difetti e del drogante sia nella fase solida che nella fase liquida del silicio. Lo studio computazionale è stato accoppiato con esperimenti mirati e il richiedente ha partecipato alla pianificazione dell'intera attività sperimentale.

Dopo il dottorato ha ricevuto due borse di ricerca presso il CNR-IMM nel campo delle simulazioni di processo del sistema difetti/drogante in processi di laser annealing, plasma-etching, deposizione, assorbimento in celle solari a multistrato e un simulatore Monte Carlo-Poisson per sistemi colloidali.

Nel marzo 2014 è entrato a far parte del gruppo del Prof. Dr. Stefan Goedecker a Basilea come ricercatore post-doc. Ha sviluppato da zero una libreria elettrochimica che estende i codici di struttura elettronica density functional theory (DFT) a primi principi ad ambienti liquidi complessi. La libreria è in grado di risolvere sia l'equazione generalizzata di Poisson che quella di Poisson-Boltzmann, consentendo di gestire implicitamente soluzioni sia neutre che ioniche nei calcoli DFT. Ha sviluppato, parametrizzato e testato un modello implicito di solvatazione chiamato "soft-sphere". Attualmente, sta applicando le previsioni strutturali ab-initio DFT e le metodologie di struttura elettronica a primi principi (DFT, DFTB + e MD) per indagare vari sistemi di interesse nella scienza dei materiali. È anche coinvolto nella completa estensione del software BigDFT a celle cristalline non ortorombiche. È stato assistente di diversi corsi, come fisica computazionale e i calcoli della struttura elettronica.

Attualmente è post-doc presso il CNR-IMM di Catania, supportando il progetto europeo H2020 "CHALLENGE" - 3C-SiC Hetero-epitaxially grown on silicon compliant substrates and 3C-SiC substrates for sustainable wide-band-Gap power devices. Sta applicando calcoli di teoria del funzionale della densità DFT ab-initio insieme a simulazioni Monte Carlo a materiali e nanosistemi di carburo di silicio (SiC).

Negli anni ha approfondito e sviluppato vari approcci teorici/computazionali applicabili a fenomeni dinamici e termodinamici della materia in tutti gli stati di aggregazione: first principle ab-initio DFT, ab-initio e Car-Parrinello MD, structure predictions, sviluppo codici DFT, Monte Carlo Cinetico, risolutori numerici alle differenze finite, partial differential equation modelling, modelling

al continuo . Ha studiato la propagazione e interazione dei fotoni con i campi e con la materia durante processi laser. Sviluppato metodi matematici e numerici finalizzati alla soluzione delle equazioni di Poisson e Poisson- Boltzmann. La sua ricerca teorica/computazionale spazia nei campi della fisica atomica e molecolare, degli stati liquidi e solidi, degli stati diluiti e dei plasmi.

Le seguenti sezioni sono riportate nel presente documento:

• Pubblicazioni in riviste internazionali (JCR)	pag. 2
• Sviluppo software	pag. 17
• Presentazioni su invito	pag. 18
• Partecipazioni a conferenze internazionali come relatore	pag. 19
• Partecipazione a workshops internazionali	pag. 21
• Responsabilità di progetto scientifico	pag. 21
• Partecipazione a progetti europei	pag. 22
• Premi e riconoscimenti	pag. 24
• Educazione e Abilitazioni	pag. 25
• Incarichi di docenza in corsi universitari	pag. 26
• Carriera nazionale e internazionale	pag. 28

### Abilitazione Scientifica Nazionale

Tipologia: Abilitazione Scientifica Nazionale - SETTORE CONCORSUALE 02/B2 FISICA TEORICA DELLA MATERIA , Professore Seconda Fascia
Data di conseguimento: 10/05/2019
Data fine: 10/05/2025 (art. 16, comma 1, Legge 240/10)
Altre informazioni: Abilitazione Scientifica Nazionale per le funzioni di Professore Universitario di seconda fascia.

### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Wet environment effects on ethanol and water adsorption on Anatase TiO <sub>2</sub> (101) surfaces
Elenco autori: G. Fisicaro, S. Filice, S. Scalese, I. Deretzis, G. Compagnini, R. Reitano, L. Genovese, S. Goedecker, G. Mannino, A. La Magna
Ruolo svolto: Studio teorico/sperimentale della superficie (101) dell' anatase TiO <sub>2</sub> ; utilizzo di modelli di solvatazione e structure predictions in ambienti liquidi; simulazioni ab-initio density functional theory; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: Submitted to Journal of Chemical Theory and Computation (2019)
Impact Factor rivista alla data del bando: 5.399 - Fonte: sito web rivista
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Direct observation of single organic molecules grafted on the surface of a silicon nanowire
Elenco autori: R. Puglisi, S. Caccamo , C. Bongiorno , G. Fisicaro , L. Genovese , S. Goedecker, G. Mannino , A. La Magna
Ruolo svolto: Studio teorico/sperimentale dei nanotubi di Silicio e del processo di molecular doping a scala atomica; utilizzo di modelli di solvatazione e structure predictions in ambienti elettrostatici complessi; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: Scientific Report
Anno pubblicazione: 2019
Impact Factor rivista alla data del bando: 4.122 - Fonte: sito web rivista
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Tailoring Active Defect Centers During the Growth of Group IV Crystals
Elenco autori: Michele Cascio, Ioannis Deretzis, Giuseppe Fisicaro, Giuseppe Falci, Giovanni Mannino and Antonino La Magna
Ruolo svolto: Sviluppo del modello KMC per l'evoluzione della crescita di substrati e nanoparticelle SiC; studio dei centri di difetti durante la crescita; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: Submitted to Special issue on <a href="#">Proceedings (MDPI)</a> (Nov 2018)
Codice identificativo (ISSN): 2504-3900
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Solvent-aware Interfaces in Continuum Solvation
Elenco autori: Oliviero Andreussi, Nicolas Georg Hörmann, Francesco Nattino, Giuseppe Fisicaro, Stefan Goedecker, and Nicola Marzari
Ruolo svolto: Sviluppo del modello solvent-aware per la solvatazione implicita in codici DFT; modelli e codice per lo studio di materiali post-silicon in ambienti elettrostatici complessi; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: Journal of Chemical Theory and Computation
Codice identificativo (ISSN): 1549-9626
Anno pubblicazione: 2019
Impact Factor rivista alla data del bando: 5.399 - Fonte: sito web rivista

Numero citazioni: 3
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Theoretical study of the laser annealing process in FinFET structures
Elenco autori: S.F. Lombardo, G. Fisicaro, I. Deretzis, A. La Magna, B. Curver, B. Lespinasse, K. Huet
Ruolo svolto: Sviluppo di modelli e del codice di simulazione laser di strutture FinFET; test e validazione dei modelli per diverse strutture di dispositivi 3 dimensionali; stesura manoscritto.
Rivista: Applied Surface Science
Codice identificativo (ISSN): 0169-4332
Anno pubblicazione: 2019
Impact Factor rivista alla data del bando: 4.439 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 1
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: <b>Review Article</b> in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Continuum Embeddings in Condensed-Matter Simulations
Elenco autori: O. Andreussi and G. Fisicaro
Ruolo svolto: Sviluppo del modello soft-sphere per la solvatazione implicita in codici DFT; modelli e codice per lo studio di materiali in ambienti elettrostatici complessi; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: International Journal of Quantum Chemistry
Codice identificativo (ISSN): 1097-461X
Anno pubblicazione: 2019
Impact Factor rivista alla data del bando: 2.568 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 6
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Surface reconstruction of fluorites in vacuum and aqueous environment
Elenco autori: G. Fisicaro, M. Sicher, M. Amsler, S. Saha, L. Genovese, S. Goedecker



Ruolo svolto: Sviluppo del codice per lo studio di materiali post-silicon in ambienti elettrostatici complessi; ricerca strutturale delle ricostruzioni superficiali della fluorite, test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: Physical Review Materials
Codice identificativo (ISSN): 2475-9953
Anno pubblicazione: 2017
Impact Factor rivista alla data del bando: -                      - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 6
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Soft-sphere continuum solvation in electronic-structure calculations
Elenco autori: Giuseppe Fisicaro, Luigi Genovese, Oliviero Andreussi, Sagarmoy Mandal, Nisanth N Nair, Nicola Marzari, Stefan Goedecker
Ruolo svolto: Sviluppo del modello soft-sphere per la solvatazione implicita in codici DFT; modelli e codice per lo studio di materiali post-silicon in ambienti elettrostatici complessi; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: Journal of Chemical Theory and Computation
Codice identificativo (ISSN): 1549-9626
Anno pubblicazione: 2017
Impact Factor rivista alla data del bando: 5.399                      - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 26
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Laser annealing in Si and Ge: Anomalous physical aspects and modeling approaches
Elenco autori: S.F. Lombardo, S. Boninelli, F. Cristiano, G. Fisicaro, G. Fortunato, M.G. Grimaldi, G. Impellizzeri, M. Italia, A. Marino, R. Milazzo, E. Napolitani, V. Privitera, A. La Magna
Ruolo svolto: Sviluppo del codice per lo studio di materiali sotto irraggiamento laser; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: Materials Science in Semiconductor Processing
Codice identificativo (ISSN): 1369-8001
Anno pubblicazione: 2017

Impact Factor rivista alla data del bando: 2.593	- Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 9	
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8	

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: A generalized Poisson and Poisson-Boltzmann solver for electrostatic environments
Elenco autori: G. Fisicaro, L. Genovese, O. Andreussi, N. Marzari, and S. Goedecker
Ruolo svolto: Sviluppo del codice per lo studio di materiali post-silicon in ambienti elettrostatici complessi; test e validazione dei modelli; stesura manoscritto.
Rivista: The Journal of Chemical Physics
Codice identificativo (ISSN): 0021-9606
Anno pubblicazione: 2016
Impact Factor rivista alla data del bando: 2.952                      - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 44
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Extended defects formation in nanosecond laser-annealed ion implanted silicon
Elenco autori: Yang Qiu, Fuccio Cristiano, Karim Huet, Fulvio Mazzamuto, Giuseppe Fisicaro, Antonino La Magna, Maurice Quillec, Nikolay Cherkashin, Huiyuan Wang, Sébastien Duguay, and Didier Blavette
Ruolo svolto: Ideazione e pianificazione esperimento; sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon a bassa dimensionalità per applicazioni in nanoelettronica e nel campo dell'energia; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Nano Letters
Codice identificativo (ISSN): 1530-6984
Anno pubblicazione: 2014
Impact Factor rivista alla data del bando: 13.592 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 20
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Modeling of laser annealing

Elenco autori: G. Fisicaro, and A. La Magna
Ruolo svolto: Review articolo sullo sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: Journal of Computational Electronics
Codice identificativo (ISSN): 1569-8025
Anno pubblicazione: 2014
Impact Factor rivista alla data del bando: 1.520                      - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 11
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### **Articoli in riviste**

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Anomalous Impurity Segregation and Local Bonding Fluctuation in l-Si
Elenco autori: G. Fisicaro, K. Huet, R. Negru, M. Hackenberg, P. Pichler, N. Taleb, A. La Magna
Ruolo svolto: Ideazione e pianificazione esperimento; sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon a bassa dimensionalità per applicazioni in nanoelettronica e nel campo dell'energia; stesura del manoscritto.
Rivista: Physical Review Letters
Codice identificativo (ISSN): 0031-9007
Anno pubblicazione: 2013
Impact Factor rivista alla data del bando: 7.512                      - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 22
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### **Articoli in riviste**

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Kinetic Monte Carlo simulations for transient thermal fields: computational methodology and application to the sub-microsecond laser processes in implanted Silicon
Elenco autori: G. Fisicaro, L. Pelaz, P. Lopez, and A. La Magna
Ruolo svolto: sviluppo del codice Monte Carlo cinetico per simulazione di processi di non equilibrio e modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: Physical Review E
Codice identificativo (ISSN): 2470-0045
Anno pubblicazione: 2012

Impact Factor rivista alla data del bando: 2.288	- Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 14	
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8	

### Proceedings in atti di congresso

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Study of the role of particle-particle dipole interaction in dielectrophoretic devices for biomarkers identification
Elenco autori: M. Camarda, S. Baldo, G. Fisicaro, R. Anzalone, S. Scalese, A. Alberti, F. La Via, A. La Magna, A. Ballo, G. Giustolisi, L. Minafra, F. Cammarata, V. Bravatà, G. Forte, G. Russo, and M. Gilardi
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Sensors
Codice identificativo (ISSN) : 978-3-319-09616-2
Anno pubblicazione: 2015
Numero citazioni: 2
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)	
Titolo: Theoretical and experimental study of the role of cell-cell dipole interaction in dielectrophoretic devices: application to polynomial electrodes	
Elenco autori: M. Camarda, G. Fisicaro, R. Anzalone, S. Scalese, A. Alberti, F. La Via, A. La Magna, A. Ballo, G. Giustolisi, L. Minafra, F. Cammarata, V. Bravatà, G. Forte, G. Russo, and M. Gilardi	
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.	
Rivista: Biomedical engineering online	
Codice identificativo (ISSN): 1475-925X	
Anno pubblicazione: 2014	
Impact Factor rivista alla data del bando: 1.427	- Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 12	
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8	

### Proceedings in atti di congresso

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
---

Titolo: Extended defects in ion-implanted Si during nanosecond laser annealing
Elenco autori: F. Cristiano, Y. Qiu, E. Bedel-Pereira, K. Huet, F. Mazzamuto, G. Fisicaro, A. La Magna, M. Quillec, N. Cherkashin, H. Wang, S. Duguay, and D. Blavette
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: 2014 Junction Technology (IWJT), 2014 International Workshop on
Codice identificativo (ISSN): 978-1-4799-3627-4
Anno pubblicazione: 2014
Numero citazioni: 1
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Role of oxygen on the electrical activation of B in Ge by excimer laser annealing
Elenco autori: G. Impellizzeri, E. Napolitani, R. Milazzo, S. Boninelli, M. Cuscunà, G. Fisicaro, A. La Magna, G. Fortunato, F. Priolo, and V. Privitera
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Physica Status Solidi (a)
Codice identificativo (ISSN): 1862-6319
Anno pubblicazione: 2014
Impact Factor rivista alla data del bando: 1.469 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 13
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Atomic scale Monte Carlo simulations of BF <sub>3</sub> plasma immersion ion implantation in Si
Elenco autori: A. La Magna, G. Fisicaro, G. Nicotra, Y. Spiegel, and F. Torregrosa
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Physica Status Solidi (c)
Codice identificativo (ISSN): 1610-1642
Anno pubblicazione: 2014
Numero citazioni: 3

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Simulation of the boron build-up formation during melting laser thermal annealing
Elenco autori: M. Hackenberg, K. Huet, R. Negru, G. Fisicaro, A. La Magna, N. Taleb, M. Quillec, and P. Pichler
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Physica Status Solidi (c)
Codice identificativo (ISSN): 1610-1642
Anno pubblicazione: 2014
Numero citazioni: 4
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: N-type doping of Ge by As implantation and excimer laser annealing
Elenco autori: R. Milazzo, E. Napolitani, G. Impellizzeri, G. Fisicaro, S. Boninelli, M. Cuscunà, D. De Salvador, M. Mastromatteo, M. Italia, A. La Magna, G. Fortunato, F. Priolo, V. Privitera, and A. Carnera
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Journal of Applied Physics
Codice identificativo (ISSN): 0021-8979
Anno pubblicazione: 2014
Impact Factor rivista alla data del bando: 2.183 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 38
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Kinetic Monte Carlo simulations of the boron activation in implanted Si under Laser Thermal Annealing
Elenco autori: G. Fisicaro, L. Pelaz, M. Aboy, P. Lopez, M. Italia, K. Huet, F. Cristiano, Z. Essa, Q. Yang, E. Bedel-Pereira, M. Quillec, and A. La Magna

Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: Applied Physics Express
Codice identificativo (ISSN): 1882-0786
Anno pubblicazione: 2014
Impact Factor rivista alla data del bando: 2.365 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 14
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: B-doping in Ge by excimer laser annealing
Elenco autori: G. Impellizzeri, E. Napolitani, S. Boninelli, G. Fisicaro, M. Cuscunà, R. Milazzo, A. La Magna, G. Fortunato, F. Priolo, and V. Privitera
Ruolo svolto: Ideazione e pianificazione esperimento; sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon a bassa dimensionalità per applicazioni in nanoelettronica e nel campo dell'energia; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Journal of Applied Physics
Codice identificativo (ISSN): 0021-8979
Anno pubblicazione: 2013
Impact Factor rivista alla data del bando: 2.183 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 28
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Proceedings in atti di congresso

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Dopant dynamics and defects evolution in implanted silicon under laser irradiations: a coupled continuum and Kinetic Monte Carlo approach
Elenco autori: G. Fisicaro, L. Pelaz, M. Aboy, P. Lòpez, M. Italia, K. Huet, F. Cristiano, Z. Essa, Q. Yang, E. Bedel-Pereira, M. Hackenberg, P. Pichler, M. Quillec, N. Taleb, and A. La Magna
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: 18 th International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)
Anno pubblicazione: 2013
Impact Factor rivista alla data del bando - Fonte

Numero citazioni: 2
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Proceedings in atti di congresso

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Kinetic Monte Carlo simulation of dopant-defect systems under submicrosecond laser thermal processes
Elenco autori: G. Fisicaro, L. Pelaz, P. Lopez, M. Italia, K. Huet, J. Venturini, and A. La Magna
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: AIP Conference Proceedings
Codice identificativo (ISSN): 0094-243X
Anno pubblicazione: 2012
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Proceedings in atti di congresso

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Modeling Boron Profiles After Pulsed Excimer Laser Annealing
Elenco autori: M. Hackenberg, P. Pichler, K. Huet, R. Negru, J. Venturini, G. Fisicaro, and A. La Magna
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: AIP Conference Proceedings
Codice identificativo (ISSN): 0094-243X
Anno pubblicazione: 2012
Numero citazioni 8
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Coupled Monte Carlo-Poisson method for the simulation of particle-particle effects in dielectrophoretic devices
Elenco autori: A. La Magna, M. Camarda and I. Deretzis and G. Fisicaro
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Applied Physics Letters



Codice identificativo (ISSN): 0003-6951
Anno pubblicazione: 2012
Impact Factor rivista alla data del bando: 3.569 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 18
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Towards a laser fluence dependent nanostructuring of thin Au films on Si by nanosecond laser irradiation
Elenco autori: F. Ruffino, A. Pugliara, E. Carria, L. Romano, C. Bongiorno, G. Fisicaro, A. La Magna, C. Spinella, and M. G. Grimaldi
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Applied Surface Science
Codice identificativo (ISSN): 0169-4332
Anno pubblicazione: 2012
Impact Factor rivista alla data del bando: 2.711 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 13
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Proceedings in atti di congresso

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Dopant activation modeling in implanted Silicon under multi-pulsed excimer laser irradiation
Elenco autori: G. Fisicaro, M. Italia, V. Privitera, G. Piccitto, L. Pelaz, P. Lopez, K. Huet, J. Venturini, and A. La Magna
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: Proceedings of LPM2011 - the 12th International Symposium on Laser Precision Microfabrication
Anno pubblicazione: 2011
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
---

Titolo: Laser annealing of SiGe and Ge based devices
Elenco autori: G. Fisicaro, A. La Magna, G. Piccitto, and V. Privitera
Ruolo svolto: Ideazione e pianificazione simulazioni; sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon a bassa dimensionalità per applicazioni in nanoelettronica e nel campo dell'energia; stesura del manoscritto.
Rivista: Microelectronic Engineering
Codice identificativo (ISSN): 0167-9317
Anno pubblicazione: 2011
Impact Factor rivista alla data del bando: 1.197 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 10
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Solid phase phosphorous activation in implanted silicon by excimer laser irradiation
Elenco autori: G. Fisicaro, M. Italia, V. Privitera, G. Piccitto, K. Huet, J. Venturini, and A. La Magna
Ruolo svolto: ideazione esperimento; sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Journal of Applied Physics
Codice identificativo (ISSN): 0021-8979
Anno pubblicazione: 2011
Impact Factor rivista alla data del bando: 2.183 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 10
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Dopant activation and damage evolution in implanted silicon after excimer laser annealing
Elenco autori: G. Fisicaro, M. Italia, V. Privitera, G. Piccitto, K. Huet, J. Venturini, and A. La Magna
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: Phys. Status Solidi C
Codice identificativo (ISSN): 1610-1642

Anno pubblicazione: 2011
Numero citazioni: 12
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Crystallization of implanted amorphous silicon during millisecond annealing by infrared laser irradiation
Elenco autori: G. Mannino, C. Spinella, R. Ruggeri, A. La Magna, G. Fisicaro, E. Fazio, F. Neri, and V. Privitera
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Applied Physics Letters
Codice identificativo (ISSN): 0003-6951
Anno pubblicazione: 2010
Impact Factor rivista alla data del bando: 3.569 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 14
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Articoli in riviste

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Defect kinetics and dopant activation in sub- $\mu$ s laser thermal processes
Elenco autori: K. Huet, G. Fisicaro, J. Venturini, H. Besaucèle and A. La Magna
Ruolo svolto: ideazione esperimento; sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: Applied Physics Letters
Codice identificativo (ISSN): 0003-6951
Anno pubblicazione: 2009
Impact Factor rivista alla data del bando: 3.569 - Fonte: sito web rivista
Numero citazioni: 27
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### Proceedings in atti di congresso

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Experimental and Theoretical analysis of Dopant Activation in Thin Double Implanted Silicon by pulsed Excimer Laser Thermal Annealing

Elenco autori: K. Huet, C. Boniface, G. Fisicaro, F. Desse, N. Variam, Y. Erokhin, A. La Magna, V. Privitera, M. Schuhmacher, H. Besaucele, J. Venturini
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Proceeding della 17th IEEE International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors
Anno pubblicazione: 2009
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### **Proceedings in atti di congresso**

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Damage Evolution in Implanted Silicon by Pulsed Excimer Laser Annealing
Elenco autori: G. Fisicaro, A. La Magna, G. Piccitto, V. Privitera, K. Huet, J. Venturini, H. Besaucele
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; stesura del manoscritto.
Rivista: Proceeding della 17th IEEE International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors
Anno pubblicazione: 2009
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### **Proceedings in atti di congresso**

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: THERMAL AND NON-THERMAL KINETICS OF DEFECTS AND DOPANT IN SI
Elenco autori: A. La Magna, G. Fisicaro, G. Mannino, V. Privitera, G. Piccitto, L. Vines, and B. G. Svensson
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Proceeding della 16th IEEE International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors
Anno pubblicazione: 2008
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

#### **Articoli in riviste**

Tipologia prodotto: Pubblicazione in rivista peer-review internazionale (JCR)
Titolo: Defect and dopant kinetics in laser anneals of Si

Elenco autori: A. La Magna, G. Fiscaro, G. Mannino, V. Privitera, G. Piccitto, B. G. Svensson, and L. Vines
Ruolo svolto: sviluppo dei modelli matematici applicabili ed esportabili a materiali post-silicon; contributo alla stesura del manoscritto.
Rivista: Mater. Sci. Eng., B
Anno pubblicazione: 2008
Numero citazioni 9
Categoria della rivista secondo classificazione ANVUR (*): Area 8

## Sviluppo software

Tipologia prodotto: Sviluppo della libreria software ENVIRON per codici di struttura elettronica
Titolo: ENVIRON
Descrizione: ENVIRON: A Library for Complex Electrostatic Environments in Electronic-structure Simulations
Elenco autori: G. Fiscaro, L. Genovese, O. Andreussi, N. Marzari, and S. Goedecker
Ruolo svolto: sviluppo degli algoritmi e implementazione dei codici fortran
Documentazione a corredo (*): sito internet <a href="http://www.quantum-environment.org/home.html">http://www.quantum-environment.org/home.html</a>
Altre informazioni: pubblicazione associata G. Fiscaro, L. Genovese, O. Andreussi, N. Marzari, and S. Goedecker "A generalized Poisson and Poisson-Boltzmann solver for electrostatic environments" The Journal of chemical physics 144 (1), 014103 (2016); G. Fiscaro, L. Genovese, O. Andreussi, S. Mandal, N. N. Nair, N. Marzari, and S. Goedecker, J. Chem. Theory Comput. 13, 3829 (2017).

## Sviluppo software

Tipologia prodotto: Sviluppo del codice numerico di struttura elettronica BigDFT
Titolo: BigDFT software package
Descrizione: BigDFT è un codice di struttura elettronica DFT (GPL) parallelo che utilizza una base wavelet. Le wavelet formano una base spaziale reale distribuita (due livelli di risoluzione nella nostra implementazione). Gli pseudopotenziali GTH o HGH sono usati per rimuovere gli elettroni del nucleo. Grazie al nostro risolutore di Poisson basato su un formalismo della funzione Green, i sistemi periodici, le superfici e i sistemi isolati possono essere simulati con le condizioni al contorno corrette.
Elenco autori: G. Fiscaro, L. Genovese, and S. Goedecker
Ruolo svolto: sviluppo degli algoritmi e implementazione dei codici fortran; estensione a celle non-ortorombiche.
Documentazione a corredo (*): sito internet <a href="http://www.bigdft.org">http://www.bigdft.org</a>

Altre informazioni: pubblicazione associata G. Fisicaro, L. Genovese, O. Andreussi, N. Marzari, and S. Goedecker “A generalized Poisson and Poisson-Boltzmann solver for electrostatic environments” The Journal of chemical physics 144 (1), 014103 (2016); G. Fisicaro, L. Genovese, O. Andreussi, S. Mandal, N. N. Nair, N. Marzari, and S. Goedecker, J. Chem. Theory Comput. 13, 3829 (2017).

## Rapporti tecnici

Tipologia prodotto: Relazione laser annealing per <b>ST microelectronics Catania</b>	
Titolo: SIMULAZIONI, MODELLI ED IMPLEMENTAZIONE DI PROCESSI LASER SU DISPOSITIVI IGBT	
Descrizione: Attraverso uno studio prevalentemente teorico-computazionale, si e' investigato l'attivazione e l'evoluzione di drogante impiantato in silicio, germanio e leghe silicio-germanio sottoposte a un particolare processo termico ultra-rapido quale l'irraggiamento laser.	
Riferimenti o n. protocollo	data Dicembre 2013
Elenco autori: G. Fisicaro. A. La Magna	
Ruolo svolto: stesura relazione con descrizione dei modelli matematici sviluppati.	

## Presentazioni su invito:

- “CECAM workshop: Liquid/solid interfaces from spectroscopy to simulations”  
25-27/01/2016, Lausanne, Switzerland. Invited oral presentation: G. Fisicaro et al.  
“Complex wet-environments in electronic-structure calculations” (<https://www.cecarn.org/workshop-1-1168.html?aid=25039>).
- “Structure predictions and electronic-structure calculations in complex wet environments”,  
CNR- IMM Catania, Italy (04/08/2017).
- “A Generalized Poisson and Poisson-Boltzmann solver in wet-environments electronic-structure calculations”, CEA Grenoble, France ( September 2015).
- “Continuous modeling of dopant activation on laser irradiated silicon”, Department of Electronic University of Valladolid ( March 2011).
- “Kinetic of dopant-defect systems under laser irradiation”, CNR-IMM Catania (December 2010).
- “Continuum models for dopant-defect evolution during excimer laser annealing in Silicon and Germanium materials”, Department of Physics - University of Catania (July 2010).

## **Partecipazioni a conferenze internazionali come relatore:**

- “Spring Meeting of the European Materials Research Society (E-MRS)”, 27-31/05/2019 Nice, France. Symposium X Silicon carbide and related materials for energy saving applications. Oral presentation “Ab-initio calibrated growth kinetics simulation of SiC substrates and nano-particles”.
- “Spring Meeting of the European Materials Research Society (E-MRS)”, 27-31/05/2019 Nice, France. Symposium X Silicon carbide and related materials for energy saving applications. Oral presentation “Structural and electronic properties of antiphase boundaries in 3C-SiC from first principles calculations”.
- “Four Marvel Retreat” 07/09/2017, Lausanne, Switzerland. Poster presentation: “Soft-sphere continuum solvation in electronic structure calculations”.
- “Coding Solvation Workshop” 23-25/08/2017, Livorno, Italy. Oral presentation: “Soft-sphere continuum solvation in electronic structure calculations”.
- “Platform for Advanced Scientific Computing PASC 2017 Conference” 26-28/06/2017, Lugano, Switzerland. Poster presentation: “Soft-sphere continuum solvation in electronic structure calculations”.
- “EMRS Spring Meeting Conference” 22-26/05/2017, Strasbourg, France. Poster presentation: “Complex wet-environments in electronic-structure calculations”.
- “Platform for Advanced Scientific Computing PASC 2016 Conference” 8-10/06/2016, EPFL (Lausanne), Switzerland. Poster presentation: “Complex wet-environments in electronic-structure calculations”
- “APS March Meeting” 14-18/03/2016, Baltimora (USA). Oral presentation: “Complex wet-environments in electronic-structure calculations”
- “Psi-k Conference 2015” 06-10/09/2015, Donostia/San Sebastian, Spain. Oral presentation: G. Fiscaro et al. “A Generalized Poisson and Poisson-Boltzmann solver in wet-environments electronic-structure calculations” Symposium Electrochemical Energy Storage and Conversion: Solid/Liquid Interfaces.
- “Second Marvel Retreat” 03-04/09/2015, Lausanne, Switzerland. Poster presentation: G. Fiscaro et al. “A solver for the Generalized Poisson equation in wet-environments electronic-structure calculations”.
- “Marvel Junior Retreat” 07-10/07/2015, Zurich, Switzerland. Oral presentation: G. Fiscaro et al. “A solver for the Generalized Poisson equation in wet-environments electronic-structure calculations”.
- “Platform for Advanced Scientific Computing PASC 2015 Conference” 1-3/06/2015, Zurich, Switzerland. Poster presentation: G. Fiscaro et al. “A solver for the Generalized Poisson equation in wet-environments electronic-structure calculations”.

- “ICTP Workshop on Advanced Quantum ESPRESSO Developer Training” 19-30/01/2015, Trieste, Italy. Poster: G. Fiscaro et al. “A generalized Poisson solver for complex electrostatic environments”.
- “ICTP International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods” 15-17/01/2015, Trieste, Italy. Poster presentation: G. Fiscaro et al. “A generalized Poisson solver for complex electrostatic environments”.
- ICMR workshop on “Ab-initio description of charged systems and solid/liquid interfaces for semi-conductors and electrochemistry”, 6-11/07/2014, Santa Barbara (CA), USA. Oral presentation: G. Fiscaro et al. “Particle-particle interaction and space-dependent effective dielectric constant in colloidal system”.
- “Platform for Advanced Scientific Computing PASC 2014 Conference” 2-3/06/2014, Zurich, Switzerland. Poster presentation: G. Fiscaro et al. “Particle-particle interaction and space-dependent effective dielectric constant in colloidal system”.
- “E-MRS 2013 Spring meeting” from 27 to 31 May 2013 Strasbourg (France). Two oral presentations: G. Fiscaro et al “Boron activation and defects dynamics in Si solid-phase during excimer laser annealing processes” and “Boron redistribution and activation in silicon liquid phase under excimer laser irradiation” Symposium K, Physics and technology of advanced extra functionality CMOS-based devices.
- “18th International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SIS-PAD)” from 3 to 5 September 2013 Glasgow (Scotland). Oral presentation: G. Fiscaro et al. “Dopant dynamics and defects evolution in implanted silicon under laser irradiations: a coupled continuum and Kinetic Monte Carlo approach”.
- “E-MRS 2012 Spring meeting” from 14 to 18 May 2012 Strasbourg (France). Oral presentation: G. Fiscaro et al “Boron pile-up in implanted silicon induced by submicrosecond laser annealing”; Poster: “Kinetic Monte Carlo simulation of Phosphorous activation in implanted Silicon by submicrosecond laser thermal annealing” Symposium A, Advanced Silicon Materials Research for Electronic and Photovoltaic Applications III.
- “19th International Conference on Ion Implantation Technology” from 25 to 29 June 2012 Valladolid (Spain). Oral presentation: G. Fiscaro et al “Kinetic Monte Carlo simulation of dopant-defect systems under submicrosecond laser thermal processes”; Poster: “Dynamics of dopant redistribution in molten Silicon caused by laser irradiation”.
- “E-MRS 2011 Spring meeting IUMRS ICAM 2011 & E-MRS/MRS Bilateral conference on energy” from 9 to 13 May 2011 Nice (France). Oral presentation: G. Fiscaro et al “Excimer laser annealing of Phosphorous implanted Silicon: experimental analysis and modeling” Symposium J, Laser materials processing for micro and nano applications.
- “12th International Symposium on Laser Precision Microfabrication” Takamatsu (Japan) from 7 to 10 June 2011. Oral presentation: G. Fiscaro et al “Dopant activation modeling in implanted Silicon under multi-pulsed excimer laser irradiation” section Micromachining and Modification.
- “E-MRS 2010 Spring Meeting” from 7 to 11 June 2010 at the Congress Center-Place de Bordeaux, Wacken, Strasbourg, France. Two oral presentations: G. Fiscaro et al “Dopant



activation and damage evolution in implanted Silicon after Excimer Laser Annealing” and Symposium I, Advanced silicon materials research for electronic and photovoltaic applications; G. Fisicaro et al “Laser annealing doping processes of SiGe and Ge based devices”. Symposium H, Post-Si CMOS electronic devices: the role of Ge and III-V materials.

- “XCVI Congress of the Italian Physics Society” 20-24/09/2010, Bologna. Oral presentation: G. Fisicaro et al “Dopant activation and damage evolution in implanted silicon by pulsed excimer laser annealing.” Section II, Material science.
- “17th IEEE International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors - RTP 2009” from 29 September to 2 October 2009 Albany-NY. Oral presentation: G. Fisicaro et al “Damage Evolution in Implanted Silicon by Pulsed Excimer Laser Annealing”.

### **Partecipazione a workshops internazionali:**

“School of the 19th International Conference on Ion Implantation Technology”, from 21 to 23 June 2012 Valladolid (Spain).

“Carbomat,international workshop on Carbon-based Low Dimensional Materials”, 5-7 December 2011, at the CNR-IMM Catania.

“35th Workshop on Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits, WOCS-DICE 2011”, from 29 May to 1 June 2011, at the CNR-IMM Catania.

“Carbomat,international workshop on Carbon-based Low Dimensional Materials”, 6-8 October 2010, at the CNR-IMM Catania.

“Challenges in Material Science”, 26 May 2010 Department of Physics - University of Catania.

### **Responsabilità di progetto scientifico per ore di calcolo**

Ruolo svolto: Principal Investigator
Titolo: Effects of complex liquid environments on material properties
Ente/Istituzione finanziatrice: Centro di calcolo CSCS Svizzera
Importo totale finanziamento: <b>Valutato eccellente e approvato.</b> Computational hours 800000 node hours (9600000 cpu hours).
Unità Operativa: CNR-IMM
Periodo di attività dal 01-10-2018 in corso

Finalità del progetto: Many important physicochemical processes take place in solution, both in the context of basic as well as industrial research. Here we aim at developing and assessing a groundbreaking theoretical/computational paradigm to study complex wet environment effects on material properties at an atomistic level. Since material properties are ultimately related to the underlying atomic structure, we plan to extend current ab-initio structure prediction codes to wet environments. Solvents will be described by a recently developed implicit solvation model, called “soft-sphere”. The approach aims at overcoming all drawbacks that hinder the application of structure predictions to wet environments. Among them, the explosion of the system size when explicit solvent molecules are considered, which makes simulations extremely costly from a computational point of view. A first application of the proposed computational paradigm has been demonstrated successful at describing surface reconstructions of fluorite in water. The methodology will be benchmarked with target experiments and molecular dynamics simulations. Molecular doping of silicon, small TiO<sub>2</sub> clusters, and surfaces in various solvents will be some of the systems to be investigated. Target experiments will be carried out by the applicant partner CNR-IMM in Catania, Italy. Here we suggest a two-year project with a total of 800000 node hours, for which we would like to have an allocation of 400000 node hours in the first year.

### Partecipazione a progetto scientifico

Ruolo svolto: Assegno di Ricerca
Titolo: CHALLENGE” - 3C-SiC Hetero-epitaxiALLY grown on silicon compliancE substrates and 3C- SiC substrates for sustaiNable wide-band-Gap powEr devices
Ente/Istituzione finanziatrice: PROGETTO EUROPEO H2020
Importo finanziamento per Unità Operativa: Istituto: per la Microelettronica e Microsistemi - Catania
Nominativo coordinatore del progetto: Dr. F. La Via
Periodo di attività dal 17/03/2014 al 16/03/2017 ( <i>oppure ancora in corso</i> )
Finalità del progetto: “PROGETTO EUROPEO H2020 DENOMINATO “CHALLENGE” - 3C-SiC Hetero-epitaxiALLY grown on silicon compliancE substrates and 3C- SiC substrates for sustaiNable wide-band-Gap powEr devices - GRANT AGREEMENT N. 720827 – CUP: B66J16001480006 ” sotto la responsabilità scientifica del Dott. Antonino La Magna.

### Partecipazione a progetto scientifico

Ruolo svolto: Ricercatore post dottorato
Titolo: Swiss PASC project “ENVIRON: A Library for Complex Electrostatic Environments in Electronic- structure Simulations”
Ente/Istituzione finanziatrice: SNF Switzerland
Nominativo coordinatore del progetto: Prof. S. Goedecker
Periodo di attività dal 17/03/2014 al 16/03/2017 ( <i>oppure ancora in corso</i> )
Finalità del progetto: development of a library to include complex wet environments in electronic-structure calculations. Development, parametrization and test of implicit solvation models for neutral and ionic sol- vents ( <a href="http://www.quantum-environment.org">http://www.quantum-environment.org</a> ).

Risultati ottenuti: il modello di solvatazione implicita “Soft-sphere” (Fisicaro-JCTC-2017, Fisicaro-PRM-2017) e il codice PCG per l’equazione di Poisson Generalizzata (Fisicaro-JCP-2016)

## Partecipazione a progetto scientifico

Ruolo svolto: Ricercatore post dottorato
Titolo: Swiss NCCR MARVEL project ( <a href="http://nccr-marvel.ch">http://nccr-marvel.ch</a> )
Ente/Istituzione finanziatrice: SNF Switzerland
Nominativo coordinatore del progetto: Prof. N. Marzari, Prof. S. Goedecker
Periodo di attività dal 17/03/2017 al 31/08/2018 ( <i>oppure ancora in corso</i> )
Finalità del progetto: centre on Computational Design and Discovery of Novel Materials, that has been cre- ated by the Swiss National Science Foundation in May 2014. The goal of the NCCR MARVEL is to radically transform and accelerate invention and discovery in science and technology, and espe- cially to transform and accelerate the design and discovery of novel materials in order to achieve improved properties and performance, or to witness the emergence of original physical proper- ties. We will achieve this goal by exploiting the predictive accuracy that quantum-mechanical simulations have now reached for realistic, complex systems, the treasure trove of ever-increasing computational power ideally suited to intrinsically parallel problems, and the powerful synergies arising with the computer science of heterogeneous data management, data mining, and machine learning. EPFL acts as the leading house, and it is directed by Nicola Marzari, but it involves 41 principal investigators across 12 Swiss Institutions: the two Federal Institutes of Technology in Lausanne and Zurich (EPFL and ETHZ), six universities in Basel, Bern, Fribourg, Geneva, Svizzera Italiana, and Zurich (UNIBAS, UNIBE, UNIFR, UNIGE, USI, UZH), the Swiss Na- tional Supercomputing Centre (CSCS), the research laboratories of IBM Zurich, the two federal research institutes, the Paul Scherrer Institute (PSI), and the Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology (Empa). The applicant integrated his research in Basel to the various work-packages of the Marvel project.
Risultati ottenuti: predizioni di strutture per materiale innovativi e per l’energia (Fisicaro-JCTC-2017, Fisicaro-PRM-2017)

## Partecipazione a progetto scientifico

Ruolo svolto: Ricercatore post dottorato
Titolo: Advanced Technology Modeling for Extra-Functionality Devices – Enlarged EU ATEMOX Grant Agreement N° 287669
Ente/Istituzione finanziatrice: Istituto per la Microelettronica e Microsistemi del CNR sezione di Catania / Unione europea
Nominativo coordinatore del progetto: Dr. A. La Magna
Riferimenti o n. protocollo n. 0000106 data 12/01/2012
Periodo di attività dal 15/01/2012 al 12/10/2012
Finalità del progetto: Simulazioni dell’evoluzione si sistemi accoppiati impurezze-difetti tramite metodiche al continuo e Monte Carlo in processi di irraggiamento laser di semiconduttori drogati

Risultati ottenuti: sviluppo di modelli per laser annealing; vedi elenco delle pubblicazioni con ringraziamento ATEMOX.

### **Premi e riconoscimenti scientifici**

Descrizione premio: “Seal of Excellence”
Assegnato da: European Commission - Research and Innovation
Data o anno di assegnazione: 2018
Altre informazioni: Project proposal 799206, COMPWET “Complex wet environments effects on material properties at atomistic level” submitted under the Horizon 2020’s Marie Skłodowska-Curie actions call H2020- MSCA-IF-2017 of 14 September 2017. The Seal of Excellence is the high-quality label awarded to projects submitted to Horizon 2020 which were deemed to deserve funding but did not receive it due to budget limits (scored 85% or above). The Seal of Excellence is recognition that your project proposal was evaluated as excellent in a highly competitive evaluation process and is recommended for funding by other sources, since Horizon 2020 resources available for this specific call were already allocated following a competitive ranking. The certificate can be used to increase the visibility and reputation of the project proposal and possibly attract the interest of public or private investors.

### **Premi e riconoscimenti scientifici**

Descrizione premio: Best poster presentation “Soft-sphere continuum solvation in electronic structure calculations”
Assegnato da: NCCR MARVEL
Data o anno di assegnazione: 2017
Altre informazioni: Best poster presentation “Soft-sphere continuum solvation in electronic structure calculations” on “Four Marvel Retreat” 07/09/2017, Lausanne, Switzerland.

### **Idoneità Concorso CNR**

Descrizione: Idoneo non vincitore
Assegnato da: CNR
Data o anno di assegnazione: 2017
Altre informazioni: Idoneo non vincitore (posizionato settimo dopo le selezioni scritte e orali, 3 Agosto 2017) per il profilo di Ricercatore a tempo indeterminato presso CNR-IMM Catania – III livello professionale - Bando 367.10 DSFTM IMM RIC, GU IV Serie Speciale n. 24 in data 25/03/2016.

## Dottorato di Ricerca

Tipologia di corso: Dottorato di ricerca in Fisica
Sede di svolgimento: Università di Catania - IMM-CNR di Catania
Durata del corso dal 1.11.2008 a 31.10.2011 ore complessive ( <i>oppure ancora in corso</i> )
Data esame finale se previsto: 1.2.2012
Votazione e/o valutazione conseguiti: cum laude
Altre informazioni: Thesis on "Micro-structural modifications of semiconductor systems under irradiation: experiment, modeling and simulation analysis". Advisors Prof. G Piccitto (Department of Physics, University of Catania) and Dr. A. La Magna (CNR-IMM Catania). Research on the micro-structural modifications of semiconductor systems during Laser Thermal Annealing processes. Post-implant kinetics of the defect-dopant system in the extremely far from the equilibrium conditions caused by laser irradiation both in the non-melting and melting regime. Accurate study of the feasibility of laser irradiation as a heat source for real patterned substrates for the case of SiGe and Ge based MOS devices. Developing of a continuum simulation code which simulates the interaction between the laser light and the transistor periodic structure in order to estimate the heat source as well as the heat diffusion, phase changes and material redistribution under irradiation.

## Laurea

Tipologia di corso: Laurea in Fisica
Sede di svolgimento: Università di Catania - IMM-CNR di Catania
Data esame finale se previsto: 14.07.2008
Votazione e/o valutazione conseguiti: 110/110 cum laude
Altre informazioni: Specialization in physics of condensed matter, semiconductor physics, theoretical and computational physics. Thesis "Evolution of defect-impurity systems in silicon under laser irradiation" supervisors Prof. G Piccitto (Department of Physics, University of Catania) and Dr. A. La Magna (CNR-IMM Catania).

## Abilitazioni professionali

### Abilitazione Scientifica Nazionale

Tipologia: Abilitazione Scientifica Nazionale - SETTORE CONCORSUALE 02/B2 FISICA TEORICA DELLA MATERIA, Professore Seconda Fascia
Data di conseguimento: 10/05/2019
Data fine: 10/05/2025 (art. 16, comma 1, Legge 240/10)
Altre informazioni: Abilitazione Scientifica Nazionale per le funzioni di Professore Universitario di seconda fascia.

**Abilitazione TFA**

Tipologia: Diploma di Abilitazione TFA all'insegnamento nelle scuole secondarie classe matematica e fisica A027
Data di conseguimento: 18/12/2013
Data di iscrizione: 18/12/2013
Altre informazioni: Votazione 95.63/100 Università di Catania

**Incarichi di docenza in corsi universitari e di alta formazione**

Denominazione ( <i>Università / Istituzione</i> ): Università di Basilea, Svizzera
Sede: Dipartimento di Fisica
Tipologia di corso: Corso di laurea in Fisica
Materia di insegnamento: Computational Physics, corso di esercitazione, attività di supporto e Fortran tutorial
Periodo di attività dal 01/10/2014 al 31/12/2014 nr. ore complessive 12 ore
Altre informazioni: Esercitazioni su problemi e programmazione Fortran

**Incarichi di docenza in corsi universitari e di alta formazione**

Denominazione ( <i>Università / Istituzione</i> ): Università di Basilea, Svizzera
Sede: Dipartimento di Fisica
Tipologia di corso: Corso di laurea in Fisica
Materia di insegnamento: Electronic-structure calculations, corso di esercitazione, attività di supporto
Periodo di attività dal 01/03/2015 al 31/04/2015 nr. ore complessive 10 ore
Riferimenti o n. protocollo non esistente
Altre informazioni: Esercitazioni su problemi e programmazione Fortran

**Incarichi di docenza in corsi universitari e di alta formazione**

Denominazione ( <i>Università / Istituzione</i> ): Università di Basilea, Svizzera
Sede: Dipartimento di Fisica
Tipologia di corso: Corso di dottorato in Nanoscience
Materia di insegnamento: Global structure predictions, corso di esercitazione, attività di supporto
Periodo di attività dal 01/04/2015 al 30/04/2015 nr. ore complessive 8 ore
Riferimenti o n. protocollo non esistente
Altre informazioni: Esercitazioni su problemi e programmazione Fortran

### **Incarichi di docenza in corsi universitari e di alta formazione**

Denominazione ( <i>Università / Istituzione</i> ): Università' di Basilea, Svizzera
Sede: Dipartimento di Fisica
Tipologia di corso: Corso di laurea in Fisica
Materia di insegnamento: Computational Physics, corso di esercitazione, attività di supporto e Fortran tutorial
Periodo di attività dal 01/10/2015 al 31/12/2015 nr. ore complessive 12 ore
Riferimenti o n. protocollo non esistente
Altre informazioni: Esercitazioni su problemi e programmazione Fortran

### **Incarichi di docenza in corsi universitari e di alta formazione**

Denominazione ( <i>Università / Istituzione</i> ): Università' di Basilea, Svizzera
Sede: Dipartimento di Fisica
Tipologia di corso: Corso di dottorato in Nanoscience
Materia di insegnamento: Global structure predictions, corso di esercitazione, attività di supporto
Periodo di attività dal 01/03/2016 al 30/03/2016 nr. ore complessive 8 ore
Riferimenti o n. protocollo non esistente
Altre informazioni: Esercitazioni su problemi e programmazione Fortran

### **Incarichi di docenza in corsi universitari e di alta formazione**

Denominazione ( <i>Università / Istituzione</i> ): Università' di Basilea, Svizzera
Sede: Dipartimento di Fisica
Tipologia di corso: Corso di laurea in Fisica
Materia di insegnamento: Computational Physics, corso di esercitazione, attività di supporto e Fortran tutorial
Periodo di attività dal 01/10/2016 al 31/12/2016 nr. ore complessive 12 ore
Riferimenti o n. protocollo non esistente
Altre informazioni: Esercitazioni su problemi e programmazione Fortran

### **Incarichi di docenza in corsi universitari e di alta formazione**

Denominazione ( <i>Università / Istituzione</i> ): Università' di Basilea, Svizzera
Sede: Dipartimento di Fisica
Tipologia di corso: Corso di laurea in Fisica

Materia di insegnamento: Computational Physics, corso di esercitazione, attività di supporto e Fortran tutorial
Periodo di attività dal 01/10/2017 al 31/12/2017 nr. ore complessive 12 ore
Riferimenti o n. protocollo non esistente
Altre informazioni: Esercitazioni su problemi e programmazione Fortran

### **Attività di referaggio di articoli**

Ruolo svolto: Reviewer for The Journal of chemical physics, Physical Chemistry Chemical Physics journal.
--

### **Partecipazione su invito a conferenze internazionali**

Tipologia conferenza: CECAM workshop: Liquid/solid interfaces from spectroscopy to simulations
Data di svolgimento: 25-27/01/2016
Riferimenti o n. protocollo lettera di invito: mail
Argomento/Contributo: Complex wet-environments in electronic-structure calculations
Altre informazioni

### **Idoneo concorso CNR a tempo indeterminato**

Altre informazioni: Idoneo non vincitore (posizionato settimo dopo le selezioni scritte e orali, 3 Agosto 2017) per il profilo di Ricercatore a tempo indeterminato presso CNR-IMM Catania – III livello professionale - Bando 367.10 DSFTM IMM RIC, GU IV Serie Speciale n. 24 in data 25/03/2016.
---

### **Contratti presso Università Estere e CNR**

<b>Data di inizio dell'assegno di ricerca: 05.09.2018</b>
Struttura: Istituto per la Microelettronica e Microsistemi del CNR sezione di Catania
Data di conclusione assegno di ricerca: in corso
Altre informazioni: bando n° AR IMM006/2018/CT per il conferimento di n° 1 assegno per lo svolgimento di attività di ricerca nell'ambito del programma di ricerca: "PROGETTO EUROPEO H2020 DENOMINATO "CHALLENGE" - 3C-SiC Hetero-epitaxiALLY grown on silicon compliance substrates and 3C- SiC substrates for sustaiNable wide-band-Gap powEr devices - GRANT AGREEMENT N. 720827 – CUP: B66J16001480006 " sotto la responsabilità scientifica del Dott. Antonino La Magna da svolgersi presso la sede dell'Istituto: per la Microelettronica e Microsistemi



<b>Data di inizio contratto a tempo determinato: 17/03/2014</b>
Struttura: Dipartimento di Fisica, Universita' di Basilea, Svizzera
Data di conclusione contratto a tempo determinato: 31/08/2018
Altre informazioni: contratto post-doc in Svizzera <b>equiparato ad RTDa</b> secondo d.m. 662 del 2016 MIUR, <b>totale quattro anni e cinque mesi</b> di contratto a tempo determinato. Sviluppo di una libreria software che estende codici di struttura elettronica ad ambienti elettrostatici complessi. La libreria è in grado di risolvere sia l'equazione generalizzata di Poisson e l' equazione di Poisson-Boltzmann, permettendo di gestire sia soluzioni neutre e ioniche in maniera implicita in calcoli DFT.

<b>Data di inizio dell'assegno di ricerca: 17.02.2014</b>
Struttura: Istituto per la Microelettronica e Microsistemi del CNR sezione di Catania
Data di conclusione assegno di ricerca: 16 Marzo 2014
Altre informazioni: Post-doc researcher at Institute for Microelectronics and Microsystems CNR from 17 February 2014 to 16 Marzo 2014

<b>Data di inizio borsa: 13-10-2012</b>
Struttura: Istituto per la Microelettronica e Microsistemi del CNR sezione di Catania
Data di conclusione assegno di ricerca: 31/12/2013
Altre informazioni: <b>Vincitore della borsa di formazione ed addestramento professionale Bando N° BS. IMM006/2012/CT</b> , Prot. N° 0003890 del 23/07/2012 pubblicato sulla G.U. N° 60 in data 03/08/2012 messa a concorso nell'ambito del progetto <i>“Formazione di esperti per la Progettazione, Realizzazione e Caratterizzazione di celle solari e sistemi concentratori” (PON01_01725)</i>

Data di inizio borsa: 15-01-2012
Struttura: Istituto per la Microelettronica e Microsistemi del CNR sezione di Catania
Data di conclusione assegno di ricerca: 12/10/2012
Altre informazioni: <b>Vincitore borsa di studio n. BS IMM005/2011/CT</b> prot. n. 0000106 in data 12-01-2012 nell'ambito del progetto di ricerca denominato “Advanced Technology Modeling for Extra-Functionality Devices – Enlarged EU ATEMOX Grant Agreement N° 287669” dalla tematica “Simulazioni dell'evoluzione si sistemi accoppiati impurezze-difetti tramite metodiche al continuo e Monte Carlo in processi di irraggiamento laser di semiconduttori drogati”

## Giacomo Marmorini - CV

---

Affiliazione: Research and Education Center for Natural Sciences, Keio University

### Istruzione

Perfezionamento (Ph.D.) in Fisica, *Cum Laude*, Dicembre 2007

Scuola Normale Superiore, Pisa

Tesi: Non-Abelian solitons and confinement

Supervisore: Prof. Kenichi Konishi (referente interno: Prof. Riccardo Barbieri)

Laurea Specialistica in Fisica, *Cum Laude*, Ottobre 2003

Università di Pisa

Tesi: Matrix models, generalized Konishi anomalies and effective description of  $\mathcal{N} = 1$  supersymmetric gauge theories

Relatore: Prof. Kenichi Konishi

Laurea in Fisica, *Cum Laude*, Marzo 2003

Università di Pisa

Tesi: Minimal Standard Model and extensions with massive neutrino

Relatore: Prof. Kenichi Konishi

### Esperienze professionali (accademia)

Giugno 2019 -. Ricercatore part-time e tutor, Department of Physics, Aoyama Gakuin University

Aprile 2017 - in corso. Postdoc presso Department of Physics and Research and Education Center for Natural Sciences, Keio University

Ottobre 2015 - Marzo 2017. Docente part-time presso Graduate School of Human and Environmental Studies, Kyoto University

Aprile 2015 - Marzo 2017. Yukawa Fellow (Research Assistant Professor) presso Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University

Marzo 2012 - Febbraio 2015. Foreign Postdoctoral Researcher presso Condensed Matter Theory Lab, The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN)

Aprile 2011 - Febbraio 2012. Postdoc presso Department of Physics, Tokyo University of Science

Marzo 2009 - Settembre 2010. Postdoc presso Department of Physics e Research and Education Center for Natural Sciences, Keio University

Ottobre 2007 - Gennaio 2008. Research Fellow presso School of Mathematics, Trinity College Dublin

### Esperienze professionali (altro)

Autunno 2010. Insegnante di Matematica presso Liceo “Giosuè Carducci”, Piombino (LI).

Estate 2008. Insegnante di Matematica presso I.S.I.S “Marco Polo”, Cecina (LI).

### **Borse di studio e di ricerca, finanziamenti**

Finanziamento Mochizuki (Yukawa Memorial Foundation) 2015

Borsa di ricerca Yukawa 2015-2017

RIKEN FPR Fellowship 2012-2015

JSPS Fellowship FY2009

Borsa di ricerca “Della Riccia” 2009

Foreign Graduate Invitation Program (FGIP), Tokyo Institute of Technology, 2006

Borsa di studio della Scuola Normale Superiore (Pisa) 2004-2006

Borsa di studio della Regione Toscana 1998-2003

### **Pubblicazioni scientifiche**

D. Yamamoto, H. Ueda, I. Danshita, G. Marmorini, T. Momoi and T. Shimokawa,  
“Exact diagonalization and cluster mean-field study of triangular-lattice XXZ antiferromagnets near saturation”,

Phys. Rev. B **96**, 014431 (2017) [arXiv:1704.04024 [cond-mat]]

G. Marmorini, M. Pepe and P. Calabrese,

“One-body reduced density matrix of trapped impenetrable anyons in one dimension”,

J. Stat. Mech. (2016) 073106 [arXiv:1605.00838 [cond-mat]]

G. Marmorini, D. Yamamoto, and I. Danshita,

“Umbrella-coplanar transition in the triangular  $XXZ$  model with arbitrary spin”,

Phys. Rev. B **93**, 224402 (2016) [arXiv:1510.07969 [cond-mat]]

D. Yamamoto, G. Marmorini and I. Danshita,

“Magnetization process of spin-1/2 Heisenberg antiferromagnets on a layered triangular lattice”,

J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 024706 (2016) [arXiv:1510.04402 [cond-mat]]

D. Yamamoto, G. Marmorini and I. Danshita,

“Microscopic Model Calculations for the Magnetization Process of Layered Triangular-Lattice Quantum Antiferromagnets”,

Phys. Rev. Lett. **114**, 027201 (2015) [arXiv:1411.4233 [cond-mat]]

featured in RIKEN Research Highlight

R. Yoshii, S. Takada, S. Tsuchiya, G. Marmorini, H. Hayakawa and M. Nitta,

“Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov states in a superconducting ring with magnetic fields: Phase diagram and the first-order phase transitions”,

Phys. Rev. B **92**, 224512 (2015) [arXiv:1404.3519 [cond-mat]]

G. Marmorini and T. Momoi,

“Magnon condensation with finite degeneracy on the triangular lattice”,

Phys. Rev. B **89**, 134425 (2014) [arXiv:1312.5935 [cond-mat]]

D. Yamamoto, G. Marmorini and I. Danshita,  
“Quantum Phase Diagram of the Triangular-Lattice  $XXZ$  Model in a Magnetic Field”,  
Phys. Rev. Lett. **112**, 127203 (2014) [Erratum: Phys. Rev. Lett. **112**, 259901 (2014)]  
[arXiv:1309.0086 [cond-mat]]

R. Yoshii, G. Marmorini and M. Nitta,  
“Spin Imbalance Effect on Josephson Junction and Grey Soliton”,  
J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 094704 (2012)

Luca Ferretti, Michele Cortelezzi, Bin Yang, Giacomo Marmorini and Ginestra Bianconi,  
“Features and heterogeneities in growing network models”,  
Phys. Rev. E **85**, 066110 (2012) [arXiv:1111.3652 [physics.soc-ph]]

R. Yoshii, S. Tsuchiya, G. Marmorini and M. Nitta,  
“Spin imbalance effect on Larkin-Ovchinnikov-Fulde-Ferrel state”,  
Phys. Rev. B **84**, 024503 (2011) [arXiv:1101.1578 [cond-mat]]

T. Fujimori, G. Marmorini, M. Nitta, K. Ohashi and N. Sakai,  
“The Moduli Space Metric for Well-Separated Non-Abelian Vortices”,  
Phys. Rev. D **82**, 065005 (2010) [arXiv:1002.4580 [hep-th]]

M. Eto, J. Evslin, K. Konishi, G. Marmorini, M. Nitta, K. Ohashi, W. Vinci and N. Yokoi,  
“On the moduli space of semilocal strings and lumps”,  
Phys. Rev. D **76**, 105002 (2007) [arXiv:0704.2218 [hep-th]]

M. Eto, L. Ferretti, K. Konishi, G. Marmorini, M. Nitta, K. Ohashi, W. Vinci and N. Yokoi,  
“Non-Abelian duality from vortex moduli: a dual model of color confinement”,  
Nucl. Phys. B **780**, 161 (2007) [arXiv:hep-th/0611313]

M. Eto, K. Hashimoto, G. Marmorini, M. Nitta, K. Ohashi and W. Vinci,  
“Universal reconnection of non-Abelian cosmic strings”,  
Phys. Rev. Lett. **98**, 091602 (2007) [arXiv:hep-th/0609214]

M. Eto, K. Konishi, G. Marmorini, M. Nitta, K. Ohashi, W. Vinci and N. Yokoi,  
“Non-Abelian vortices of higher winding numbers”,  
Phys. Rev. D **74**, 065021 (2006) [arXiv:hep-th/0607070]

K. Konishi, G. Marmorini and N. Yokoi,  
“Nonabelian confinement near nontrivial conformal vacua”,  
Nucl. Phys. B **741**, 180 (2006) [arXiv:hep-th/0511121]

S. Bolognesi, K. Konishi and G. Marmorini,  
“Light nonabelian monopoles and generalized  $r$ -vacua in supersymmetric gauge theories”,  
Nucl. Phys. B **718**, 134 (2005) [arXiv:hep-th/0502004]

## Proceedings con peer-review

G. Marmorini, R. Yoshii, S. Tsuchiya and M. Nitta

“Analytic Self-Consistent Condensates in quasi-1D Superfluid Fermi Gases in the Andreev approximation”,  
J. Low Temp. Phys. **175**, 420 (2014) - Proceedings (with peer-review) of *The International Conference on Quantum Fluids and Solids QFS2013*, 1 -6 Agosto 2013, Matsue, Japan

### Proceedings

S. Bolognesi, K. Konishi and G. Marmorini  
“Light nonabelian monopoles: constructing dual nonabelian superconductor of more general types”,  
Prog. Theor. Phys. Suppl. **164**, 186 (2006) - Proceedings of the *International Workshop “Frontiers of Quantum Physics”*, 17 - 19 February 2005, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan

### Insegnamenti

Semestre autunnale 2015 e 2016. Metodi matematici della fisica - Kyoto University (Graduate School of Human and Environmental Studies) - 45 ore.

### Altre attività professionali

Referee per Physical Review B, Physical Review E.  
Partecipazione all’Iniziativa Specifica INFN PI21 e poi PI14 dal 01-01-2004 al 30-06-2007.

### Presentazioni orali

“Exploring frustration on the triangular lattice: from novel quantum order-by-disorder to BKT physics” Università di Pisa , 6 marzo 2018; Johannes Gutenberg University, Mainz, 19 marzo 2018.

[[Su invito](#)] “On the different kinds of superfluid vortices in the interior of neutron stars”, NORDITA program *Phase Transitions in Astrophysics*, 11 maggio 2017, Stockholm, Sweden

“New results for triangular-lattice quantum antiferromagnets in a magnetic field”, Waseda University, Tokyo, 4 marzo 2016.

“New results for triangular-lattice quantum antiferromagnets in a magnetic field”, *20th International Conference on Magnetism (ICM2015)*, 7 luglio 2015, Barcelona.

“Microscopic modeling of the quantum triangular antiferromagnet Ba<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>”, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, 8 aprile 2015.

“New results for quantum antiferromagnets in high magnetic fields”, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, 22 maggio 2014, Kyoto, Giappone; Scuola Normale Superiore, 16 luglio 2014, Pisa; Joint SISSA/ICTP Seminars, 21 luglio 2014, Trieste; Université Pierre et Marie Curie, Paris, 18 dicembre 2014.

“High magnetic field phases of the  $J_1$ - $J_2$  and  $J_1$ - $J_3$  triangular antiferromagnet”, *JPS Fall Meeting 2013*, 25 settembre 2013, Tokushima, Giappone; APS March meeting, 7 marzo 2014, Denver CO, USA.

“Exact self-consistent condensates in (imbalanced) superfluid Fermi gases”, Department of Physics, Niigata University, 2 settembre 2010, Niigata, Giappone; Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, 7 settembre 2010, Kyoto, Giappone; APS March meeting, 20 marzo 2013, Baltimore MD, USA.

“An invitation to Topological Quantum Computation”, Keio University, 14 luglio 2009, Yokohama, Giappone.

“On the moduli space of semilocal strings and lumps”, *School “Gauge fields and strings”*, Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences, 24 settembre 2007, Cambridge, UK

“Nonabelian vortices of higher winding number”, HEP theory group seminar, University of Tokyo at Hongo, 24 agosto 2006, Tokyo, Giappone; Theory seminar, The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), 25 agosto 2006, Wako, Giappone

“Nonabelian duality and confinement”, FGIP seminar, Tokyo Institute of Technology, 4 agosto 2006, Tokyo, Giappone

“The moduli space of composite nonabelian vortices”, *XVth Oporto Meeting in Geometry, Topology and Physics “Mathematical aspects of supersymmetry”*, 23 luglio 2006, Porto, Portogallo; Theoretical Particle Physics seminar, Tokyo Institute of Technology, 2 agosto 2006, Tokyo, Giappone

“Light Nonabelian Monopoles and Generalized r-Vacua in Supersymmetric Gauge Theories”, *XXVII Theoretical Physics Meeting*, 26 maggio 2005, Cortona (AR)

### **Presentazioni con poster**

“Umbrella-coplanar transition in the triangular XXZ model with arbitrary spin”, *Highly Frustrated Magnetism 2016*, 8 settembre 2016, Taipei, Taiwan.

“New results for quantum antiferromagnets in high magnetic fields”, *Higgs Modes in Condensed Matter and Quantum Gases*, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, 24 giugno 2014, Kyoto, Giappone

“Magnon condensation with finite degeneracy on the triangular lattice”, *Novel Quantum Materials and Phases (NQMP2014)*, 14 marzo 2014, Okinawa Institute of Technology, Okinawa, Giappone; *Highly Frustrated Magnetism 2014*, 8 luglio 2014, Cambridge, UK

“High magnetic field phases of the J1-J2-J3 triangular antiferromagnet”, *The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems SCES2013*, Tokyo University, 6 agosto 2013, Tokyo, Giappone

“High magnetic field phases of the J1-J3 triangular antiferromagnet”, *Physics of Quantum Spin Systems*, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, 13 novembre 2012, Kyoto, Giappone

“Exact Self-Consistent Condensates in (Spin-Imbalanced) Fermionic Gases”, *International*

*Conference on Novel Superconductivity in Taiwan 2011 (ICNSCT2011)*, National Cheng Kung University, 6 agosto 2011, Tainan, Taiwan; *International Workshop for Young Researchers on Topological Quantum Phenomena in Condensed Matter with Broken Symmetries*, 1 - 5 novembre 2011, Biwa-ko (Shiga), Giappone; *The International Conference on Quantum Fluids and Solids QFS2013*, 3 agosto 2013, Matsue, Giappone

“Exact self-consistent condensates in (imbalanced) superfluid Fermi gases”, *Ultracold Fermi Gas: Superfluidity and Strong-Correlation (USS-2010)*, CCSE, Japan Atomic Energy Agency, 14 maggio 2010, Tokyo, Giappone.

“Off-diagonal correlations of anyons in one dimension”, *Infinite Analysis 09 - New trends in quantum integrable systems*, Department of Mathematics, Kyoto University, 29 luglio 2009, Kyoto, Giappone

### **Scuole, conferenze, workshops**

Organizzatore del *Topological Science Symposium 2017*, Keio University, 21 - 22 novembre 2017, Yokohama, Japan.

Partecipante in 37 eventi internazionali and 8 domestici.

### **Visite accademiche**

SISSA, Trieste, Dicembre 2014; agosto 2016; marzo 2018

Waseda University, Tokyo, Giappone, aprile 2015; marzo 2016

Institute of Photonic Science (ICFO), Castelldefels, Spagna, giugno 2012

Dipartimento di Fisica, Università di Pisa, maggio 2012

Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Giappone, settembre 2010

Institute for the Physics and the Mathematics of the Universe, Tokyo University, Tokyo, Giappone, febbraio 2010

Theoretical Physics Laboratory, The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), Wako, Giappone - agosto 2006

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Giappone - luglio/agosto 2006

Physique Théorique et Mathématique, Université Libre de Bruxelles, Bruxelles, Belgio - dicembre 2005; Ottobre 2006.

### **Altre competenze**

- *Lingue*: Italiano (madrelingua), Inglese (fluente), Giapponese (buono), Spagnolo (buono), Francese (basilare),
- *Competenze informatiche*  
Sistemi operativi: Mac OS, Linux, Windows  
Applicazioni: Microsoft Office, iWork (Keynote), Open Office  
Linguaggi di programmazione: L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X, Mathematica, C

## **Curriculum vitae**

Nome: Tria Francesca

Lingue: italiano (madrelingua), inglese (buono), francese (buono)

Posizione attuale: ricercatrice (Rtda) presso Sapienza Università di Roma (Italia), Dipartimento di Fisica.

Abilitazioni: (dal 2017) Abilitazione Scientifica Nazionale per professore di seconda fascia nei settori: FIS 02/B2, FIS 02/A2 e FIS 02/D1.

## **FORMAZIONE**

2003, Dottorato in fisica conseguito presso l'Università di Napoli Federico II (relatore: Luca Peliti). Titolo di tesi: Modelli Statistici di evoluzione: Teoria dei giochi e coevoluzione virus-sistema immunitario.

2000, Laurea in fisica (cum laude) conseguita presso Sapienza Università di Roma (relatore: Prof. Giorgio Parisi). Titolo di tesi: Vetri di spin in reticoli diluiti.

## **CARRIERA PROFESSIONALE**

2016 febbraio-ad oggi, ricercatrice (Rtda) presso Sapienza Università di Roma, Dipartimento di Fisica.

2010 febbraio-2016 gennaio, ricercatrice presso la Fondazione ISI, Complex Systems Lab, Torino, Italia

2006 novembre-2010 gennaio, post-doc presso la Fondazione ISI, Torino, Italia.

2004 gennaio-2006 gennaio, post-doc presso l'International Centre of Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italia.

## **INTERRUZIONI DI CARRIERA**

2016 novembre-2017 aprile, congedo di maternità.

2012 novembre-2013 aprile, congedo di maternità.

## **ALTRE POSIZIONI**

2017 aprile-settembre, visitatrice presso la Fondazione ISI, Torino, Italia.

2016- ad oggi, external faculty member del Complexity Science Hub in Vienna (<https://www.csh.ac.at>).

2015 aprile-maggio, visitatrice presso la SONY Computer Science Lab (SONY-CSL) a Parigi ([www.csl.sony.fr](http://www.csl.sony.fr)).

2011 aprile, visitatrice presso la Yeshiva University, New York, Stati Uniti.

2009 agosto, visitatrice presso il Theoretical Physics Dep. del Centro Atómico Bariloche, Argentina.

2002 novembre-dicembre, visitatrice presso l'Institute for Theoretical Physics, Univ. of Cologne, Germania.

## **RESPONSABILITÀ SCIENTIFICHE ED ISTITUZIONALI**

2009-2016, supervisione scientifica del gruppo di ricerca diretto dal prof. Vittorio Loreto presso la Fondazione ISI.

2011-2014, coordinamento locale ad ISI del progetto EveryAware.

2014-2015, coordinamento locale ad ISI del progetto Elise.

2014-2017, coordinamento locale ad ISI del progetto Kreyon.

## **PROGETTI FINANZIATI**

2018-2019 Contratto di consulenza tra il SONY Computer Science Laboratory a Parigi e il Dipartimento di Fisica di Sapienza Università di Roma. Tema: Innovation dynamics and Digital platform for sustainability and forecasting. Ruolo: responsabile scientifico.

2017 Progetto d'Ateneo. Titolo: Modelling complex systems in the digital era. Ruolo: partecipante.



2014 - 2017 Kreyon - Unfolding the dynamics of creativity, novelties and innovation - funded by the Templeton Foundation. Ruolo: coordinatrice locale delle attività di ricerca del polo ad ISI.

2014 – 2015 Elise - Environment Live Sensing - funded in the framework of Programma operativo regionale (POR FESR) of Regione Piemonte. Ruolo: partecipante e coordinatrice locale delle attività di ricerca del polo ad ISI.

2011 – 2014 EveryAware - Enhancing environmental awareness through social information technologies - ([www.everyaware.eu](http://www.everyaware.eu)), funded by the EU 7th Framework Programme (FP7). Ruolo: partecipante e coordinatrice locale delle attività di ricerca del polo ad ISI.

## ATTIVITÀ DIDATTICA

2019 dicembre, docente del corso *Entropia, Complessità, Informazione* (minicorso per il percorso di eccellenza, laurea triennale) presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica. (a.a. 2018-2019).

2018 ottobre-2019 gennaio, docente del corso *Fisica dei sistemi complessi* presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica. (a.a. 2018-2019).

2017 ottobre-2018 gennaio, docente del corso *Fisica dei sistemi complessi* presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica. (a.a. 2017-2018).

2016 marzo-giugno, assistente al corso *Fisica I*, presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di chimica, (a.a. 2015-2016).

2016 gennaio, ciclo di lezioni (6 ore) nell'ambito del corso *Fisica dei sistemi complessi* presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica. (a.a. 2015-2016). Argomento delle lezioni: *Dinamica delle innovazioni*.

2013 dicembre, ciclo di lezioni (4 ore) nell'ambito del corso *Fisica dei sistemi complessi* presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica. (a.a. 2013-2014). Argomento delle lezioni: *Dinamica delle innovazioni*.

2011 dicembre, ciclo di lezioni (8 ore) nell'ambito del corso *Fisica dei sistemi complessi* presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica. (a.a. 2012-2011). Argomento delle lezioni: *Modelli di evoluzione, ricostruzione filogenetica e virus dell'influenza*.

2011 aprile, ciclo di lezioni (6 ore) nell'ambito del corso *Survey of Contemporary Physics (Honors Program)* presso la Yeshiva University, Physics Dept., (a.a. 2010-2011). Argomento delle lezioni: *Processi evolutivi e ricostruzione filogenetica*.

2010 dicembre, ciclo di lezioni (6 ore) nell'ambito del corso *Fisica dei sistemi complessi* presso Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica. (a.a. 2010-2011). Argomento delle lezioni: *Ricostruzione filogenetica e applicazioni in biologia e linguistica*.

## SUPERVISIONE DI STUDENTI DI TESI E DOTTORATO

### Studenti di dottorato (correlatrice):

Simone Pompei (2009-2012). Titolo di tesi: *Phylogenetic trees: inference, analysis and modeling*. Università di Torino, PhD Programme in Complexity in Post-Genomic Biology.

Giovanna Chiara Rodi (2013-2017). Titolo di tesi: *Human exploration of complex knowledge spaces*. Department of Mathematical Sciences, Dottorato di Ricerca in Applied Mathematics – XXIX Ciclo.

### Studenti di tesi magistrale (correlatrice):

(2009) Simone Pompei. Titolo di tesi: *Comparative analysis of the efficiency of phylogenetic algorithms*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

(2010) Lorenzo Taggi. Titolo di tesi: *Percolation processes inspired by epidemic spreading*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

(2011) Martina Pugliese. Titolo di tesi: *Modeling viral evolutionary dynamics with epistatic interactions*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

(2013) Marco Pietrosanto. Titolo di tesi: *Agent based study on cooperation and social norms*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

(2013) Giovanna Chiara Rodi. Titolo di tesi: *Statistical modeling of learning paths*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

(2015) Greta Greco. Titolo di tesi: *Super-diffusive processes in innovation dynamics*. Università degli Studi di Torino, dipartimento di fisica.

**Studenti di tesi magistrale (relatrice):**

(2018) Ambra D'amico. Titolo di tesi: *Inference and machine learning approach to the facial beauty perception process*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

(2017-2018) Margherita Lalli. Titolo di tesi: *Authorship attribution via sequence compression methods*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

(2018-2019) Gian Luca Lancia. Titolo di tesi: *Studio dell'apprendimento non supervisionato in reti neurali di tipo Boltzmann Machine*. Sapienza Università di Roma, physics department.

(2018-2019) Mattia Eluchans. Titolo di tesi: *Algoritmi di inferenza bayesiana per l'identificazione di topic nei testi*. Sapienza Università di Roma, physics department.

(2018-in corso) Silvia Rognone

(2018-in corso) Leonardo Pizzirani

**Studenti di tesi triennale (correlatrice):**

(2017) Pietro Pisanisi. Titolo di tesi: *Spazi delle possibilità nei modelli di emergenza delle novità*. Sapienza Università di Roma, dipartimento di fisica.

**ORGANIZZAZIONE DI CONFERENZE E SEMINARI**

2011 febbraio, Meeting PRIN 2008: Language, texts and keys (linguaggio, testi e tasti). Bagnovignoni (Siena), Italia.

2015 settembre, Primo evento pubblico del progetto Kreyon, Palazzo delle Esposizioni, Roma, Italia.

(<http://www.kreyon.net/kreyonDay/>)

2015 settembre, Kreyon workshop, presso Sapienza Università di Roma, Italia.

(<http://www.kreyon.net/kreyonWorkshop/>).

2016, Satellite workshop "CreativEvolang: Creativity and innovation in language evolution" at EvolangXI, New Orleans (<https://creativevolang.wordpress.com/program/>).

2016, Satellite workshop "Determinants of Creativity and Innovation in Science, Art and Technology" at CCS2016, Amsterdam, (<http://www.kreyon.net/ccs2016/>).

2016, Secondo evento pubblico del progetto Kreyon (<http://www.kreyon.net/kreyonDays/>).

2017, Kreyon conference, "Unfolding the dynamics of creativity and innovation", Palazzo delle Esposizioni, Rome (<http://kreyon.net/kreyonConference/>), and the open conference "The complexity of the future", Palazzo delle Esposizioni, Rome (<http://kreyon.net/kreyonOpenConference/>).

**ALTRE ATTIVITÀ**

Co-editrice del libro *Language Dynamics*, Special Issue of *Advances in Complex Systems* 15 (03n04)

(<http://dx.doi.org/10.1142/S0219525912030026>).

Co-editrice del libro *Participatory Sensing, Opinions and Collective Awareness*, Series Understanding Complex Systems, Springer International Publishing AG Editors: Loreto, V., Haklay, M., Hotho, A., Servedio, V.D.P., Stumme, G., Theunis, J., Tria, F. (Eds.), 2017, (ISBN 978-3-319-25658-0).

**Attività di referaggio per le riviste internazionali:** Europhysics Letters, Physics A, EPJB, JSTAT, Cognitive Science, Language Dynamics and Change, Scientific Reports, Physical Review Letters, Advances in Complex Systems, Royal Society Open Science, PLOS ONE.

**RELAZIONI SU INVITO IN SCUOLE, CONFERENZE E SEMINARI**

2019 settembre, Lake Como School of Advanced Studies "Model-Guided Data Science", Como, Italia.

2019 luglio, International workshop “Complex Networks: from socio-economic systems to biology and brain”, Lipari, Italia.

2018, CSH Public Conference: “Complexity – Where do we go from here?”, Complexity Science Hub, Vienna. (<https://www.csh.ac.at/news-external-faculty-where-to-go-from-here/>)

2017, Kreyon conference, “Unfolding the dynamics of creativity and innovation”, Palazzo delle Esposizioni, Rome (<http://kreyon.net/kreyonConference/>).

2016, Satellite of the Conference on Complex System 2016 (CCS2016) "Determinants of Creativity and Innovation in Science, Art and Technology".

2016, International Summer School at lake Como School of Advanced Study, “Creativity and evolution. Games, language, robots, life, art”.

2016, International workshop “Complex Networks: from socio-economic systems to biology and brain” ”, Lipari, Italia.

2015, Lorentz Center in Leiden, workshop: “Capturing Phylogenetic Algorithms for Linguistics”.

2015, Italian Physical Society (SIF) Congress, “Complex Systems” section.

2014, SigmaPhi2014 - International Conference on Statistical Physics 2014, Rhodes, Greece: “Complex Network workshop”.

2014, Evolang X, Vienna: workshop “How grammaticalization processes create grammar: From historical corpus data to agent-based models”.

2014, German Physical Society (DPG) meeting, Dresden: Section of Condensed Matter.

2014, Sapienza Univ. of Rome, workshop “On the emergence of consensus and misunderstanding”.

2010, INdAM Meeting - Hyperbolic Dynamical Systems in the Sciences. Corinaldo, Italy.

2007, Summer school: Statistical Physics of Gene Regulation - From Networks Expression Data and Back, Jacobs University, Bremen.

## **RELAZIONI IN CONFERENZE E SEMINARI**

2016 Conference on Complex Systems 2016 (CCS2016) Title: The dynamics of innovation through the expansion in the adjacent possible.

2016 STATPHYS26 : 26nd International Conference on Statistical Physics, Lyon, France, 2016. Title: The dynamics of innovation through the expansion in the adjacent possible.

2014 SigmaPhi2014 - International Conference on Statistical Physics 2014, Rhodes, Greece, main conference. Title: The dynamics of correlated novelties.

2012 Evolang IX - the 9th International Conference on the Evolution of Language, Kyoto, Japan. Title: Naming a structured world: a cultural route to duality of patterning.

2011 ECAL Satellite Workshop on Alife Approaches to Artificial Language Evolution, Paris, France. Title: Naming a structured world: a cultural route to duality of patterning. *Best paper prize*.

2010 BIOCOMP'10 - The 2010 International Conference on Bioinformatics & Computational Biology, Las Vegas. Title: A Fast Noise Reduction Driven Distance-Based Phylogenetic Algorithm.

2008 5th European Conference on Complex Systems (ECCS), Jerusalem. Title: A message-passing approach for graphs alignment.

2007 Jacobs University, Bremen. Workshop: Interfaces between physics and computer science. Bremen. Title: Classification of cancer tissues from microarray expression data.

2005 Workshop on Infectious Disease: Theoretical, Ecological and Economic Approaches, ICTP, Trieste. Title: A minimal model for influenza A evolution.

2005 Les Houches, France: Statistical Physics of Glasses, Spin Glasses, Information Processing and Combinatorial Optimisation. Title: On the Talagrand theorem in spherical p-spin models.

## **PRESENTAZIONE DI POSTER IN CONFERENZE E SEMINARI**

2004 STATPHYS22 : 22nd International Conference on Statistical Physics, Bangalore, India.

2002 Unifying Concepts in Glass Physics. Accademia dei Lincei, Roma.

## SEMINARI SU INVITO

Mantova, seminario pubblico nell'ambito di "Mantova Scienza" (<http://www.mantovascienza.it/>) (2017).  
Medical University of Vienna, Section for Science of Complex Systems (in the framework of seminars on "Analysis of Complex Systems") (2015).

Yeshiva University, NY, Psychology Dept. (2010, 2011) and Physics Dept. (2011).

Meeting PRIN 2008: Language, texts and keys. Bagnovignoni (2011).

Centro Atómico Bariloche, San Carlos de Bariloche, Argentina (2009).

## FORMAZIONE E BREVE DESCRIZIONE DELLE ATTIVITÀ DI RICERCA SVOLTE

La mia formazione è in meccanica statistica e fisica dei sistemi complessi, con una particolare attenzione ad applicazioni interdisciplinari. Durante la mia attività di ricerca ho guardato a problemi sia di interesse biologico sia legati alle scienze sociali, occupandomi da una parte di *inferenza e problemi inversi*, dall'altra di *modellizzazione*, accompagnata sempre da un'analisi di dati reali. Mi sono occupata in particolare di:

### Problemi di interesse biologico:

**Dinamica evolutiva del virus dell'influenza A.** Ho iniziato ad occuparmi di questo problema durante il dottorato e l'ho poi ripreso e sviluppato durante il periodo di ricerca ad ISI. Comprendere le dinamiche evolutive del virus dell'influenza è cruciale per la messa a punto di strategie di controllo e prevenzione ed anche un problema teorico interessante. Comprendere infatti in dettaglio il tipo di interazione tra virus e sistema immunitario dell'ospite è un problema ancora largamente aperto. Le mie principali attività in quest'ambito sono state: (i) modellizzazione e analisi dati (sequenze di RNA virale codificante la proteina HA, principalmente coinvolta nell'interazione virus- sistema immunitario). Abbiamo evidenziato il ruolo delle correlazioni dinamiche nelle mutazioni nell'evoluzione del virus; (ii) analisi filogenetica e studio della topologia dell'albero filogenetico (secondo un approccio che lega la topologia dell'albero filogenetico alla dinamica evolutiva del virus, in particolare al tipo di pressione selettiva a cui esso è soggetto). Abbiamo introdotto misure efficaci per quantificare lo sbilanciamento degli alberi filogenetici virali.

**Ricostruzione filogenetica.** La ricostruzione filogenetica è un particolare problema inverso la cui rilevanza è stata recentemente riscoperta in diversi campi di ricerca come l'immunodinamica, l'epidemiologia, la linguistica. Mi sono occupata in particolare di metodi per la ricostruzione filogenetica basati sulla distanza. Abbiamo introdotto uno schema algoritmico per la ricostruzione delle filogenesi abbinando un approccio di meccanica statistica (tecniche Monte Carlo) allo sfruttamento delle proprietà matematiche delle distanze sugli alberi. Abbiamo testato l'algoritmo implementato su dati sintetici, dimostrandone la competitività rispetto allo stato dell'arte, soprattutto in presenza di un alto livello di rumore (mutazioni all'indietro e / o trasferimento orizzontale). Abbiamo poi applicato il nostro schema algoritmico a problemi di ricostruzione dell'albero delle lingue e di alberi filogenetici di virus ad RNA.

**Inferenza su dati di micro-array.** Ho lavorato su un approccio basato su metodi di meccanica statistica per la classificazione supervisionata di dati ad alta dimensione. In particolare ho lavorato sulla classificazione di tessuti cancerosi sulla base di dati di espressione genica.

### Problemi legati alle scienze sociali:

**Dinamica del linguaggio.** In quest'ambito il linguaggio è visto come una proprietà emergente di una popolazione di individui, prodotto di interazioni sociali volte alla comunicazione. In particolare, secondo lo schema dei giochi linguistici proposti da Wittgenstein, ho utilizzato modelli ad agenti, insieme ad una ricerca delle variabili rilevanti nei dati disponibili, per proporre possibili meccanismi che spiegassero diverse proprietà del linguaggio umano. Tra queste: (i) la gerarchia (universale) osservata nell'ordine in cui appaiono i nomi dei colori in diverse culture; (ii) la natura sia combinatoria che compositiva del linguaggio umano; (iii) l'emergere di lingue creole, in particolare negli Stati coloniali del Nord e Centro America; (iv) l'evoluzione della complessità del linguaggio, in particolare delle sue forme regolari e irregolari, guardando dati sui verbi inglesi.

**Dinamica delle opinioni:** Nell'ambito del progetto EveryAware ho partecipato alla creazione di una nuova piattaforma tecnologica volta a permettere ai cittadini stessi di raccogliere dati su diversi parametri ambientali

(in questo caso inquinamento da polveri sottili e inquinamento acustico). Da una parte questo ha permesso di avere mappe dettagliate sui dati in esame, dall'altro di coinvolgere i cittadini nell'opera di monitoraggio, secondo l'idea della partecipazione volta a dare consapevolezza. In questo contesto, è stata creata anche una piattaforma di computazione web, Experimental Tribe (XTribe, [www.tribibe.eu](http://www.tribibe.eu)), per eseguire giochi / esperimenti basati sul web, come uno strumento importante per capire i comportamenti individuali e collettivi umani. A questa attività si è affiancata un'attività di modellizzazione tramite modelli ad agenti volta a comprendere il ruolo dell'informazione esterna e della pressione sociale sui cambiamenti d'opinione collettivi.

#### Altri argomenti di ricerca:

**Generazione automatica di musica:** In questo ambito abbiamo fatto un primo lavoro, come prova di concetto, applicando da un lato metodi di massima entropia, dall'altra metodi dalla teoria dell'informazione, per riconoscimento dello stile del compositore e per la generazione di musica artificiale “*alla maniera di..*”. Il lavoro è stato motivato da una collaborazione con il SONY Computer Science Lab (SONY-CSL) a Parigi.

### **ATTIVITÀ DI RICERCA ATTUALI**

Negli ultimi anni ho iniziato a lavorare su problemi legati alla **dinamica delle innovazioni**. L'innovazione, intesa come entrata nel sistema di elementi *nuovi*, caratterizza la maggior parte dei sistemi biologici, sociali e tecnologici su scale di tempo comparabili con quella dell'evoluzione del sistema stesso. Da questa prospettiva, una comprensione dei meccanismi sottostanti attraverso cui emergono novità e innovazioni è cruciale per comprendere il comportamento dei sistemi in esame, dall'evoluzione di un virus, alle mutazioni di cellule cancerose, all'emergere di nuove tecnologie.

Da un punto di vista teorico, il problema è quello di fare previsioni su sistemi in cui lo spazio delle fasi non è fissato ma è aperto, cioè in continua espansione e non è dunque evidente come definire a priori le variabili rilevanti. Un esempio per fissare le idee è quello del linguaggio, in cui nuove parole entrano in continuazione a far parte del lessico utilizzato e un dizionario chiuso, costituito da un insieme predefinito di parole, non riesce a descrivere il sistema in maniera opportuna su scale di tempo già di poche generazioni.

Un concetto che si è rivelato particolarmente utile nella descrizione di sistemi in cui è presente innovazione è quello del *possibile adiacente*, originariamente introdotto da Stuart Kauffman in ambito biologico. L'adiacente possibile è lo spazio delle possibilità che sono “*ad un passo di distanza*” da ciò che è attuale (idee, strutture linguistiche, concetti, molecole, genomi, artefatti tecnologici, ecc., a seconda del contesto). Possiamo vedere l'innovazione come una espansione dello spazio degli elementi attuali, che induce a sua volta una espansione del possibile adiacente, favorendo quindi innovazioni successive.

In particolare, abbiamo modellizzato sistemi in cui è presente innovazione tramite modelli basati sulle urne di Polya e random walk su grafi dinamici e pesati. Nel primo caso i modelli considerati generalizzano i noti processi di Dirichlet e Poisson-Dirichlet, *processi stocastici* largamente usati in problemi di inferenza bayesiana non parametrica.

### **PUBBLICAZIONI**

#### **IN PREPARAZIONE**

Enrico Ubaldi, Francesca Tria, Raffaella Burioni and Vittorio Loreto, *The exploration of the Adjacent Possible explains the emergence and evolution of social networks*, In preparazione.

#### **RIVISTE INTERNAZIONALI**

1. Francesca Tria, Vittorio Loreto, Vito D.P. Servedio, *Zipf's, Heaps' and Taylor's laws are determined by the expansion into the adjacent possible*. Entropy **2018**, 20(10), 752 (2018).
2. Bernardo Monechi, Alvaro Ruiz-Serrano, Francesca Tria, and Vittorio Loreto, *Waves of novelties in the expansion into the adjacent possible*. PLoS one 12 (6), e0179303 (2017).
3. Giovanna Chiara Rodi, Vittorio Loreto, Francesca Tria, *Search Strategies of Wikipedia Readers*. PLoS one 12 (2), e0170746 (2017).
4. Jason Sakellariou, Vittorio Loreto, Francois Pachet, Francesca Tria, *Maximum entropy model captures melodic styles*. Scientific Reports 7 (1), 9172 (2017).
5. Bernardo Monechi, Pietro Gravino, Vito D. P. Servedio, Francesca Tria and Vittorio Loreto, *Significance and popularity in music production*. Royal Society open science 4 (7), 170433 (2017).
6. M Pugliese, V Loreto, S Pompei, F Tria. *Exploring the evolution of pathogens organised in discrete antigenic clusters*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2016 (9), 093306 (2017).
7. Christine Cuskley, Claudio Castellano, Francesca Colaiori, Vittorio Loreto, Martina Pugliese, Francesca Tria, *The regularity game: Investigating rule dynamics in a population of interacting agents*. Cognition 159, 25-32 (2017).
8. Christine Cuskley, Francesca Colaiori, Claudio Castellano, Vittorio Loreto, Martina Pugliese, Francesca Tria, *The adoption of linguistic rules in native and non-native speakers: Evidence from a Wug task*. Journal of Memory and Language, 84, 205-223 (2015).
9. Alina Sîrbu, Martin Becker, Saverio Caminiti, Bernard De Baets, Bart Elen, Louise Francis, Pietro Gravino, Andreas Hotho, Stefano Ingarra, Vittorio Loreto, Andrea Molino, Juergen Mueller, Jan Peters, Ferdinando Ricchiuti, Fabio Saracino, Vito D. P. Servedio, Gerd Stumme, Jan Theunis, Francesca Tria, Joris Van den Bossche, *Participatory Patterns in an International Air Quality Monitoring Initiative*. PLoS ONE, <http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0136763>, (2015).
10. G.C. Rodi, V. Loreto, V.D.P. Servedio, and F. Tria, *Optimal learning paths in information networks*, Scientific Report 5, Article number: 10286. doi:10.1038/srep10286 (2015).
11. Francesca Tria, Vito D.P. Servedio, Vittorio Loreto, and Salikoko S. Mufwene, *Modeling the emergence of contact languages*, PLoS ONE 10(4) (2015).
12. F. Colaiori, C. Castellano, C. Cuskley, V. Loreto, M. Pugliese, F. Tria, *General three-state model with biased population replacement: Analytical solution and application to language dynamics*, Phys. Rev. E 91 (2015).
13. Cuskley CF, Pugliese M, Castellano C, Colaiori F, Loreto V, Tria F, *Internal and External Dynamics in Language: Evidence from Verb Regularity in a Historical Corpus of English*, PLoS ONE 9(8): e102882. doi:10.1371/journal.pone.0102882 (2014).
14. F. Tria, V. Loreto, V.D.P. Servedio and S.H. Strogatz, *The dynamics of correlated novelties*, Scientific Report 4, Article number: 5890. doi:10.1038/srep05890 (2014).
15. Becker, M., Caminiti, S., Fiorella, D., Francis, L., Gravino, P., Haklay, M., Hotho, A., Loreto, Mueller, J., Ricchiuti, F., V., Servedio, VDP., Sîrbu, A., Tria, F. (2013), *Awareness and learning in participatory noise sensing*, PLoS ONE, 8(12): e81638.

16. A. Sîrbu, V. Loreto, V.D.P. Servedio and F. Tria, *Cohesion, consensus and extreme information in opinion dynamics*, Advances in Complex Systems, 16 (1350035).
17. F. Tria, S. Pompei, V. Loreto, Dynamical correlated mutations drive human Influenza A evolution, Scientific Reports 3, Article number: 2705. doi:10.1038/srep02705. (2013).
18. S.K. Maity, A. Mukherjee, F. Tria and V. Loreto, *Emergence of fast agreement in an overhearing population: The case of naming game*, Euro. Phys. Lett., 101, 68004 (2013).
19. A. Sîrbu, V. Loreto, V.D.P. Servedio and F. Tria, *Opinion dynamics with disagreement and modulated information*, Journal of Statistical Physics, Volume 151, Issue 1-2, pp 218-237 (2013).
20. L. Taggi, F. Colaiori, V. Loreto and F. Tria, *Dynamical correlations in the escape strategy of Influenza A virus*, Euro. Phys. Lett., 101, 68003 (2013).
21. S. Pompei, V. Loreto and F. Tria, *Phylogenetic properties of RNA viruses*, PLoS ONE 7(9): e44849 (2012).
22. F. Tria, B. Galantucci and V. Loreto, *Naming a structured world: a cultural route to duality of patterning*, PLoS ONE 7(6): e37744 (2012).
23. V. Loreto, A. Mukherjee and F. Tria, *On the origin of the hierarchy of color names*, Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) 109 (18), pag. 6819-6824, (2012).
24. A. Mukherjee, V. Loreto and F. Tria, *Why are basic color terms basic?*, Advances in Complex Systems (ACS) 15, 1150016 (2012).
25. S. Pompei, V. Loreto and F. Tria, *On the accuracy of language trees*, PLoS ONE, 6(6), e20109 (2011).
26. V. Loreto, A. Baronchelli, A. Mukherjee, A. Puglisi and F. Tria, *Statistical physics of language dynamics*, J. Stat. Mech. (2011) P04006.
27. F. Tria, A. Mukherjee, A. Baronchelli, A. Puglisi and V. Loreto, *A fast no-rejection algorithm for the Category Game*, Journal of Computational Science 2 (4), pag.316-323 (2011).
28. A. Mukherjee, F. Tria, A. Baronchelli, A. Puglisi and V. Loreto, *Aging in language dynamics*, PLoS ONE, 6(2), e16677 (2011).
29. S. Pompei, E. Caglioti, V. Loreto and F. Tria, *Distance-based Phylogenetic algorithms: new insights and applications*, M3AS, 20 Supplementary Issue 1, pp. 1511-1532 (2010).
30. F. Tria, E. Caglioti, V. Loreto and A. Pagnani, *A stochastic local search approach to language trees reconstruction*, Diachronica XXVII:2 (2010). Special issue: Quantitative Approaches to Linguistic Diversity: Commemorating the centenary of the birth of Morris Swadesh.
31. F. Tria, E. Caglioti, V. Loreto and A. Pagnani, *A Stochastic Local Search algorithm for distance- based phylogeny reconstruction*, Molecular Biology and Evolution, 27, 2587-95 (2010).
32. S. Bradde, A. Braunstein, H. Mahmoudi, F. Tria, M. Weigt and R. Zecchina, *Aligning graphs and finding substructures by a cavity approach*, Europhys. Lett. 89, 37009 (2010).



33. A. Pagnani, F. Tria and M. Weigt, *Classification and sparse-signature extraction from gene- expression data*, J. Stat. Mech. P05001 (2009).
34. S. Franz and F. Tria, *A note on the Guerra and Talagrand theorems for Mean Field Spin Glasses: the simple case of spherical models*, Journal of Statistical Physics 122, 313-332 (2006).
35. F. Tria, M. Lässig, L. Peliti and S. Franz, *A minimal stochastic model for Influenza evolution*, JSTAT: Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, P07008 (2005).
36. M. Lässig, L. Peliti and F. Tria, *Evolutionary games and quasispecies*, Europhysics Letters 62 446 (2003).
37. G. Parisi and F. Tria, *Spin glasses on Bethe lattices for large coordination number*, Eur. Phys. J. B 30, 533-541 (2002).

## PROCEEDINGS

1. Margherita Lalli, Francesca Tria and Vittorio Loreto, *Data-compression approach to authorship attribution*, Proceeding of the Workshop "Drawing Elena Ferrante's Profile", Padova University Press (2018).
2. Simone Pompei, Francesca Tria and Vittorio Loreto, *Copystree: gaming artificial phylogenies*, Language Dynamics and Change, 8 (1): 55-77 (2018).
3. Pietro Gravino, Bernardo Monechi, Vito D. P. Servedio, Francesca Tria and Vittorio Loreto, *Crossing the horizon: exploring the adjacent possible in a cultural system*, Proceedings of The Seventh International Conference on Computational Creativity (ICCC16), (2016).
4. M. Pugliese, V. Loreto, C. Cuskley, C. Castellano, F. Colaiori and F. Tria, *The role of coordination in regularization*, In: E. Cartmill, S. Roberts, H. Lyn and H. Cornish (eds.), The Evolution of Language (Evolang): Proceedings of the 10th International Conference, p 260-261. London: World Scientific.
5. Cuskley, C., Castellano, C., Colaiori, F., Loreto, V., Pugliese, M. and Tria, F. (2014). *Frequency and stability of linguistic variants*. In: Cartmill, E., Roberts, S., Lyn, H. and Cornish, H. (Eds.), The Evolution of Language (Evolang): Proceedings of the 10th International Conference, p 417-418. London: World Scientific.
6. V. Loreto, P. Gravino. V.D.P. Servedio and F. Tria, *On the emergence of syntactic structures: quantifying and modelling duality of patterning*, Proceedings of the Workshop on Origins of Communication Systems: Modeling and Ethologically-based Theory, Konrad Lorenz Institute for Evolution and Cognition Research, Altenberg, Austria (2013). Special Issue of *topiCS* on New frontiers in language evolution and development.
7. Caminiti, S., Cicali, C., Gravino, P., Loreto, V., Servedio, VDP., Sîrbu, A., Tria, F. (2013), *XTribe: a web-based social computation platform*, IEEE Proceedings of the Third International Conference on Cloud and Green Computing, pp 397-403, Karlsruhe, Germany.
8. C. Cicali, P. Gravino, V. Loreto, G. Paolacci, V.D.P. Servedio, F. Tria, M. Warglien, *Experimental tribe: a new general platform for web-gaming and social computation*, Proceedings of Second Workshop on Computational Social Science and the Wisdom of Crowds (NIPS 2011).



9. F. Tria, E. Caglioti, V. Loreto, S. Pompei, *A Fast Noise Reduction Driven Distance-Based Phylogenetic Algorithm*, Proceedings of BIOCOMP'10 - The 2010 International Conference on Bioinformatics & Computational Biology (2010).
10. L. Peliti, F. Tria and M. Lässig, *Quasispecies evolution in phenotypic space*, Proceedings of the International Conference BIOCOMP 2002, Vietri sul Mare, 3-9 June 2002.

#### CAPITOLI DI LIBRO E CONTRIBUTI SU INVITO

1. V. Loreto, V.D.P. Servedio, S.H. Strogatz, F. Tria, *Dynamics on expanding spaces: modeling the emergence of novelties*, in: Mirko Degli Esposti, Eduardo G. Altmann, François Pachet (Ed.): *Creativity and Universality in Language*, pp. 59-83, Springer International Publishing, 2016, ISBN: 978-3-319-24401-3 (2016).
2. F. Tria, *The dynamics of innovation through the expansion in the adjacent possible*, IL NUOVO CIMENTO C, vol.39, ISSN:2037-4909, (2016).
3. Vittorio Loreto and Francesca Tria, *Language games: Comment on Modelling language evolution: Examples and predictions by Tao Gong, Lan Shuai, Menghan Zhang*, Physics of Life Reviews, ISSN 1571-0645, <http://dx.doi.org/10.1016/j.plrev.2014.01.006> (2014).
4. F. Tria and V. Loreto, *The Blending Game: emergence of duality of patterning in an interacting population*, book chapter, L. Steels ed., Springer (2013).
5. A. Baronchelli, V. Loreto and F. Tria, *Language Dynamics (Editorial)*, Advances in Complex Systems (ACS) 15, 1203002 (2012).
6. V. Loreto and F. Tria, *In Silico Linguistics: Comment on "Modeling the cultural evolution of language" by Luc Steels*, Physics of Life Reviews, 8, Issue 4, pp. 339-356, (2011).
7. V. Loreto and F. Tria, *Linguistica "in silico"*, invited contribution for Sistemi Intelligenti, August 2011, pag. 319-328.

#### LIBRI

V. Loreto, A. Baldassarri, V.D.P. Servedio and F. Tria, *Fisica generale. Meccanica. 130 esercizi risolti*, McGraw Hill ISBN: 978-88-386-6795-4 (2012).

A. Baronchelli, V. Loreto, F. Tria (Eds.), *Language Dynamics*, Special Issue of Advances in Complex Systems 15 (03n04) (2012).

V. Loreto, M. Haklay, A. Hotho, V.D.P. Servedio, G. Stumme, J. Theunis, F. Tria (Eds.), *Participatory Sensing, Opinions and Collective Awareness*, Series Understanding Complex Systems, Springer International Publishing AG, ISBN: 978-3-319-25656-6 (Print) 978-3-319-25658-0 (Online) (2016).

V. Loreto, V.D.P. Servedio, F. Tria, *The science of the new*, Oxford University Press, In preparazione.

#### RICADUTA MEDIATICA NAZIONALE E INTERNAZIONALE

"Colours: Differing points of hue". Philip Ball, Under the radar, BBC - Future, 27th April 2012.  
(<http://www.bbc.com/future/story/20120427-when-is-a-colour-not-a-colour>)

“Hierarchy of Color Naming Matches the Limits of Our Vision System”. Charles Choi, LiveScience, 16th April 2012. (<http://www.livescience.com/19704-colors-names-human-vision.html>)

“Hierarchy of Color Naming Matches the Limits of Our Vision System”. Charles Choi, Scientific American, 16th April 2012. (<http://www.scientificamerican.com/article.cfm?id=how-colors-get-their-name>)

“Na wit en zwart komt altijd rood”. Hilde Van den Eynde, De Standaard, 17th April 2012. (<http://www.standaard.be/artikel/detail.aspx?artikelid=FA3OQMJT>)

“Riddled with irregularities: Why are languages so different and disorderly?” Philip Ball, Prospect Magazine, 22 August 2012. (<http://www.prospectmagazine.co.uk/magazine/riddled-with-irregularity/>)

The Mathematics of Novelties and Innovations. Samuel Arbesman, 08.06.14 Wired  
(<http://www.wired.com/2014/08/the-mathematics-of-novelties-and-innovations/>)

The mathematics of discovering new things. Rachel Feltman, The Washington Post, August 1, 2014.  
(<http://www.washingtonpost.com/news/speaking-of-science/wp/2014/08/01/the-mathematics-of-discovering-new-things/>)

News Picks: Mathematical model explores evolution through correlated novelties Physics Today 04 agosto 2014.  
(<http://scitation.aip.org/content/aip/magazine/physicstoday/news/news-picks/mathematical-model-explores-evolution-through-correlated-novelties-a-news-pick-post>)

Come ti misuro l’innovazione. Josephine Condemi, nòva (Il Sole 24 ore), 18 Febbraio 2018.

Mathematical Model Reveals the Patterns of How Innovations Arise, MIT technology review (2017)  
(<https://www.technologyreview.com/s/603366/mathematical-model-reveals-the-patterns-of-how-innovations-arise/>)

Roma 22/07/2019