

**PAOLO GIANNOZZI – Curriculum Vitæ**  
(Aggiornato a Settembre 2024)

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

Da Ottobre 2024 Professore ordinario di Fisica della Materia (PHYS-04/A)  
Dipartimento di Scienze Matematiche, Informatiche e Fisiche, Università di Udine  
Via delle Scienze 206, 33100 Udine, tel: +39/0432-558216, email: [paolo.giannozzi@uniud.it](mailto:paolo.giannozzi@uniud.it)  
web: <https://physicslab.uniud.it/persone/paolo-giannozzi>

**Istruzione**

26 Febbraio 1988: Dottorato all'Università di Losanna (Svizzera): "Propriétés magnétiques du Dioxide d'Uranium: analyse théorique", relatore P. Erdős.

24 Giugno 1982: Laurea in Fisica all'Università di Pisa, con lode, relatore G. Pastori.

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

**Esperienza professionale**

30 Ottobre 2006 – 30 Settembre 2024 Professore associato di Fisica della Materia (FIS/03) all'Università di Udine. Confermato in ruolo dal 30 ottobre 2009.

1 Ottobre 1991 – 29 Ottobre 2006: ricercatore universitario presso la Scuola Normale Superiore di Pisa. Confermato dal 1 ottobre 1994.

1 Luglio 1988–Ottobre 1991: Post-Doc all'IRRMA (Institut Romand de Recherche Numérique en Physique des Matériaux), Politecnico Federale di Losanna (EPFL)

Giugno 1983–Giugno 1988: "Assistant Doctorant" (assistente) all'Istituto di Fisica Teorica dell'Università di Losanna.

Ho inoltre trascorso diversi periodi come scienziato visitatore presso il CECAM a Losanna (6-7/2011) e a Lione (1-6/1997), l'Università di Princeton (9/1999–8/2001), i laboratori IBM di Zurigo (9-12/1993).

**Riconoscimenti e premi**

Ho conseguito l'idoneità come professore ordinario (settore 02/B2) all'ASN 2013.

Nel 2004 avevo conseguito l'idoneità in Francia per posti di professore.

Dal 2013 sono Fellow of the American Physical Society, Division of Computational Physics. Outstanding Referee 2015 per l'American Physical Society.

Membro dell'Editorial Board di *Electronic Structure*, un nuovo giornale dell'IOP.

**Attività didattica**

Dall'A.A. 2016-2017 al 2022-2023 ho svolto i seguenti corsi:

*Fisica Generale Modulo 1* (6 crediti, 48 ore) per Matematica

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

*Metodi Numerici in Meccanica Quantistica* per L.M. Fisica Interateneo (6 crediti, 48 ore)

Dal 2006 sono stato relatore di otto tesi di laurea (3 per L.T. e 2 per L.M. in Matematica, 2 per L.M. in Fisica e 1 per L.M. in Fisica Computazionale)

## Attività di ricerca

La mia ricerca si svolge in tre direzioni principali:

- Simulazioni numeriche da principi primi (dalla struttura elettronica) con tecniche di teoria del Funzionale Densità (DFT), applicate a sistemi etero- e nano-strutturati;
- Sviluppo di nuove metodologie per calcoli di struttura elettronica;
- Sviluppo di software scientifico per calcoli di struttura elettronica su macchine ad alte prestazioni.

Specifici argomenti di ricerca attualmente in corso sono i seguenti:

- *Software scientifico all’exa-scala*: Coordino lo sviluppo e il porting all’exa-scala (cioè su computer capaci di  $10^{18}$  operazioni al secondo) del pacchetto QUANTUM ESPRESSO (<http://www.quantum-espresso.org>), uno dei più diffusi software open-source per lo studio di materiali da principi primi. Tale attività è condotta nell’ambito del Centro di Eccellenza Horizon-2020 MaX-3 (Materials design at the eXascale, sito web: <http://www.max-center.eu>).
- *Nuovi metodi per il trasporto elettronico in nanostrutture*: si vuole estendere il metodo non-equilibrium Green’s function sviluppato da Marco Pala e David Esseni (Dipartimento Politecnico di Ingegneria e Architettura) complementandolo con coefficienti di interazione elettrone-fonone calcolati da principi primi.
- *Simulazione di materiali bidimensionali biomimetici per batterie ricaricabili zinco-aria*, progetto PRIN 2DORNOT2D (2022XXJNRS), e *Shedding light where 2D materials go 3D: energy transfer and second coordination sphere at biomimetic model surfaces*, progetto PRIN-PNRR (P2022B3WCB). I due progetti sono condotti da due assegnisti di ricerca (Asha Yadav e Basant Rhoonde) in collaborazione con il gruppo sperimentale di Erik Vesselli a Trieste. Il primo progetto ha come scopo capire le proprietà catalitiche di nuovi sistemi eterostrutturati, formati da strati autoassemblati di molecole metallorganiche (porfirine) depositate su substrati come grafene. Il secondo progetto si focalizza sulla cobalamina (vitamina B-12) come potenziale catalizzatore.
- *Proprietà e reattività di deep eutectic solvents (DES)*: progetto PON 2014-2020, Azione IV.6 “tematiche Green”, in collaborazione con Miguel Angel Soler Bastida, Federico Fogolari, e altri. I DES sono delle miscele caratterizzati da un punto di fusione molto più basso di quello delle componenti separate. Molti DES, in particolare i NADES (natural DES), presentano un interesse come potenziali solventi e reagenti a basso impatto ambientale in alcune importanti reazioni. Lo studio consiste in simulazioni di dinamica molecolare classica ed è condotto in collaborazione con vari gruppi sperimentali.

Maggiori informazioni sul sito web del *Laboratorio di simulazioni classiche e quantistiche*: <https://physicslab.uniud.it/laboratorio-comp>.

## Pubblicazioni

Sono autore di 125 pubblicazioni indicizzate in riviste internazionali con referee, citate 46000 volte in 35000 articoli (indice H: 39), dati Web of Science Settembre 2024.