

# Guido Fratesi – Curriculum Vitae

## Dati anagrafici e recapiti:

Nome:	Guido	Email:	fratesi@mater.unimib.it
Cognome:	Fratesi	Residenza:	Via Cagnoni, 1 - 27100 Pavia (PV) - Italia
Data di nascita:	28.09.1978	Telefono:	+39.02.6448.5183 (ufficio)
Cittadinanza:	Italiana		+39.329.1086307 (cellulare)

## Interessi di ricerca:

Prevalentemente sullo studio, tramite metodi teorico-computazionali da principi primi, delle proprietà elettroniche e strutturali delle superfici di solidi metallici e della loro interazione con adsorbati (atomi e molecole di interesse per la catalisi e il magnetismo), in particolare: adsorbimento di metalli alcalini (mutue interazioni e diffusione correlata); catalisi eterogenea ad opera dei metalli di transizione; effetto di disomogeneità alla superficie per la crescita e le proprietà elettroniche di nanostrutture.

Le tecniche usate si basano soprattutto sulla Teoria del Funzionale Densità tramite codici di simulazione ad ampia diffusione, con enfasi sull'aspetto applicativo ed interpretativo (specialmente in collaborazione di gruppi sperimentali) ma con interesse anche per lo sviluppo metodologico ed implementativo.

Inoltre, metodi per la trattazione anche a molti elettroni di processi rilevanti per la spettroscopia elettronica, quale l'effetto Auger per transizioni core-valenza-valenza.

## Istruzione:

- 24.10.2005 Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA/ISAS), Trieste, Italia  
*Doctor Philosophiae* in Teoria degli Stati Condensati (equipollente al titolo di Dottore di Ricerca in Fisica), *cum laude*. Supervisore: Prof. Stefano de Gironcoli. Titolo tesi: "Low temperature methane-to-methanol conversion on transition metal surfaces".
- 21.10.2003 Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA/ISAS), Trieste, Italia  
*Magister Philosophiae*, voto 30/30 *cum laude*. Supervisor: Prof. Stefano Baroni e Prof. Stefano de Gironcoli. Titolo tesi: "Molecular self-assembly of trimesic acid on Cu(110) surfaces".
- 11.04.2002 Università degli Studi di Milano-Bicocca, Milano, Italia  
*Laurea in Fisica* (quadriennale), voto 110/110 *cum laude*. Supervisore: Prof. Gian Paolo Brivio. Titolo tesi: "Effetti a molti corpi nel jellium semi-infinito".
- 14.07.1997 Liceo Scientifico E. Medi, Senigallia, Italia  
*Diploma di maturità scientifica*, voto 60/60.

## Attività di ricerca:

- Lug 2011 Università degli Studi di Milano-Bicocca, Milano, Italia  
- Giu 2012 *Assegno di ricerca* su simulazioni da principi primi per processi di annichilazione tripletto-tripletto; responsabile: Prof. Gian Paolo Brivio.
- Mar 2011 Università degli Studi di Milano-Bicocca e Università degli Studi di Milano, Milano, Italia  
- Giu 2011 *Collaborazione* con il Prof. Gian Paolo Brivio, il Dott. Mario Italo Trioni, e il Prof. Giovanni Onida per lo studio da principi primi di spettri Auger core-valenza-valenza in coincidenza risolti in angolo.

- Mar 2007      Università degli Studi di Milano-Bicocca, Milano, Italia  
 - Feb 2011    *Assegno di ricerca* su proprietà elettroniche di superfici di solidi; responsabile: Prof. Gian Paolo Brivio, in collaborazione con il Dott. Mario Italo Trioni. Collaborazioni esterne: gruppo di Fisica delle Superfici (resp. Prof. Bill Allison), Cavendish Laboratory, University of Cambridge (UK); gruppo di Fisica delle Superfici (resp. Prof. Giovanni Stefani), Dipartimento di Fisica, Università Roma Tre; gruppo di Teoria a Molti Corpi (resp. Prof. Michele Cini), Dipartimento di Fisica, Università Roma Tor Vergata; gruppo di Materiali Micro e Nanostrutturati (resp. Prof. Carlo Enrico Bottani), Dipartimento di Energia, Politecnico di Milano.
- Mar 2006      Università degli Studi di Milano, Milano, Italia  
 - Feb 2007    *Assegno di ricerca* su proprietà a molti corpi di superfici di solidi, nell'ambito del *network* di eccellenza "NANOQUANTA" (EU-FP6); responsabile: Prof. Giovanni Onida.
- Gen 2006      Università degli Studi di Milano-Bicocca, Milano, Italia  
 - Feb 2006    *Collaborazione* con il Prof. Gian Paolo Brivio e il Dott. Mario Italo Trioni, per il calcolo di proprietà spettrali di superfici di metalli.
- Nov 2005      Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA/ISAS), Trieste, Italia  
 - Dic 2005    *Collaborazione* con il Prof. Stefano de Gironcoli su: simulazioni numeriche di assorbimento e catalisi eterogenea; implementazione del metodo "Projector Augmented Wave" nel pacchetto di simulazioni Quantum-ESPRESSO.
- Nov 2002      Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA/ISAS), Trieste, Italia  
 - Ott 2005    *Studente di Dottorato*, sotto la supervisione del Prof. Stefano de Gironcoli.
- Mag 2002      University of York, York, UK  
 - Lug 2002    *Collaborazione* con il Prof. Rex W. Godby e il Prof. Gian Paolo Brivio (Milano-Bicocca) per il calcolo di proprietà spettrali di superfici di metalli.

### **Attività didattica:**

- 2009-2010    Esercitatore (professore a contratto) per il corso di Teoria della Materia Condensata, per il e 2010-11 Corso di Laurea Specialistica in Fisica dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca.
- 2008-2009    Esercitatore (professore a contratto) per il corso di Fisica Atomica e Molecolare, per il Corso di Laurea Specialistica in Fisica dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca.
- 2007-2008    Esercitatore (professore a contratto) per il corso di Struttura della Materia, per il Corso di Laurea Specialistica in Fisica dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca.
- 2005-2007    Seminari per il corso di Teoria Quantistica dei Sistemi a Molti Corpi, per il Corso di Laurea Specialistica in Fisica dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca.
- 2004-2005    Supporto alle esercitazioni per il corso di Tecniche Computazionali per la Struttura Elettronica, per il Corso di Laurea Specialistica in Fisica dell'Università degli Studi di Trieste.
- 2005-2008    Docente a diverse edizioni di tutorial del software di simulazione numerica *Quantum ESPRESSO*: Luglio 2008, Cape Town, South Africa; Agosto 2006, Urbana, IL, USA; Settembre 2005, Cagliari, Italia; Aprile 2005, Isfahan, Iran; Gennaio 2005, Trieste, Italia.

### **Supervisione di studenti:**

- 2011          Correlatore della tesi di laurea specialistica in Fisica di Giuseppe Barbalinardo, "Quantum theory of the inverse Faraday effect for ultrafast magneto-optics", Università degli Studi di Milano-Bicocca

## Publicazioni:

- 24 S. Achilli, G.P. Brivio, G. Fratesi, e M.I. Trioni  
*Spin Polarized Metastable Helium De-excitation Processes on Metal Surfaces*  
J. Phys. Chem. A 115, 8498 (2011)  
ISSN:1089-5639; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1021/jp2005875>
- 23 V. Sirtori, P. L. Cavallotti, R. Rognoni, X. Xu, G. Zangari, G. Fratesi, M.I. Trioni, e M. Bernasconi  
*Unusually Large Magnetic Anisotropy in Electrochemically Deposited Co-Rich Co–Pt Films*  
ACS Appl. Mater. Interfaces 3, 1800 (2011)  
ISSN:1944-8244; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1021/am200267u>
- 22 F. Donati, G. Fratesi, M. Passoni, C.S. Casari, A. Mairov, C.E. Bottani, M.I. Trioni, e A. Li Bassi  
*Strain effect on local electronic properties of Fe nanoislands grown on Au(111)*  
Phys. Rev. B 83, 153404 (2011)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.83.153404>
- 21 F. Carone Fabiani, G. Fratesi, e G.P. Brivio  
*Adsorption of H<sub>2</sub>S, HS, S, and H on a stepped Fe(310) surface*  
Eur. Phys. J. B 78, 455 (2010)  
ISSN:1434-6028; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2010-10616-8>
- 20 G. Fratesi  
*First-principles investigation of the early stages of Pd adsorption on Au(111)*  
J. Phys.-Condens. Matter 23, 015001 (2011)  
ISSN:0953-8984; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/23/1/015001>
- 19 C. Huang, G. Fratesi, D.A. MacLaren, W. Luo, G.P. Brivio, e W. Allison  
*Charge redistribution in the formation of one-dimensional lithium wires on Cu(001)*  
Phys. Rev. B 82, 081413(R) (2010)  
Selezionato come *Rapid Communication e Editor's Suggestion*  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.081413>
- 18 G. Fratesi, A. Pace, e G.P. Brivio  
*Short-range lateral interactions and depolarization of Na atoms on Cu surfaces*  
J. Phys.-Condens. Matter 22, 304005 (2010)  
ISSN:0953-8984; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/22/30/304005>
- 17 A. Picone, G. Fratesi, A. Brambilla, P. Sessi, F. Donati, S. Achilli, L. Maini, M.I. Trioni, C.S. Casari, M. Passoni, A. Li Bassi, M. Finazzi, L. Duò, e F. Ciccacci  
*Atomic corrugation in scanning tunneling microscopy images of the Fe(001)-p(1×1)O surface*  
Phys. Rev. B 81, 115450 (2010)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.115450>
- 16 H. Hedgeland, P.R. Kole, H.R. Davies, A.P. Jardine, G. Alexandrowicz, W. Allison, J. Ellis, G. Fratesi, e G.P. Brivio  
*Surface dynamics and friction of K/Cu(001) characterized by helium-3 spin-echo and density functional theory*  
Phys. Rev. B 80, 125426 (2009)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.80.125426>

- 15 P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, e R.M. Wentzcovitch  
*QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*  
J. Phys.-Condens. Matter 21, 395502 (2009)  
ISSN:0953-8984; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- 14 G. Fratesi  
*Potential energy surface of alkali atoms adsorbed on Cu(001)*  
Phys. Rev. B 80, 045422 (2009)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.80.045422>
- 13 M.I. Trioni, G. Fratesi, S. Achilli, e G.P. Brivio  
*Dynamics of electron distributions probed by helium scattering*  
J. Phys.-Condens. Matter 21, 264003 (2009)  
ISSN:0953-8984; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/26/264003>
- 12 M.I. Trioni, A. Zanetti, G. Fratesi, e G.P. Brivio  
*Spin polarized Auger electrons in Core-Valence-Valence decays of 3d impurities in metals*  
Phys. Rev. B 79, 165115 (2009) e Phys. Rev. B 81, 079901(E) (2010)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.165115> e  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.079901>
- 11 G. Fratesi, M.I. Trioni, G.P. Brivio, S. Ugenti, E. Perfetto, e M. Cini  
*Ab initio calculation of core-valence-valence Auger spectra in closed shell systems*  
Phys. Rev. B 78, 205111 (2008)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.205111>
- 10 G. Fratesi, G. Alexandrowicz, M.I. Trioni, G.P. Brivio, e W. Allison  
*Crucial electronic contributions to measures of surface diffusion by He atom scattering*  
Phys. Rev. B 77, 235444 (2008)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.77.235444>
- 9 S. Ugenti, M. Cini, E. Perfetto, F. Da Pieve, C. Natoli, R. Gotter, F. Offi, A. Ruocco, G. Stefani, F. Tommasini, G. Fratesi, M.I. Trioni, e G.P. Brivio  
*Spin selectivity by Auger-photoelectron coincidence spectroscopy*  
J. Phys.: Conf. Ser. 100, 072020 (2008)  
ISSN:1742-6596; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/100/7/072020>
- 8 Th. Classen, M. Lingenfelder, Y. Wang, R. Chopra, C. Virojanadara, U. Starke, G. Costantini, G. Fratesi, S. Fabris, S. de Gironcoli, S. Baroni, S. Haq, R. Raval, e K. Kern  
*Hydrogen and Coordination Bonding Supramolecular Structures of Trimesic Acid on Cu(110)*  
J. Phys. Chem. A 111, 12589 (2007)  
ISSN:1089-5639; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1021/jp076037o>
- 7 G. Fratesi, P. Gava, e S. de Gironcoli  
*Direct methane-to-methanol conversion: insight from first-principles calculations*  
J. Phys. Chem. C 111, 17015 (2007)  
ISSN:1932-7447; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1021/jp074134b>

- 6 G.P. Brivio, G. Butti, S. Caravati, G. Fratesi, e M.I. Trioni  
*Theoretical approaches in adsorption: alkali adatom investigations*  
J. Phys.-Condens. Matter 19, 305005 (2007)  
ISSN:0953-8984; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/19/30/305005>
- 5 A. Kokalj, N. Bonini, S. de Gironcoli, C. Sbraccia, G. Fratesi, e S. Baroni  
*Methane dehydrogenation on Rh@Cu(111): A first-principles study of a model catalyst*  
J. Am. Chem. Soc. 128, 12448 (2006)  
ISSN:0002-7863; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1021/ja060114w>
- 4 G. Fratesi e S. de Gironcoli  
*Analysis of methane-to-methanol conversion on clean and defective Rh surfaces*  
J. Chem. Phys. 125, 044701 (2006)  
ISSN:0021-9606; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.2219448>
- 3 T. Classen, G. Fratesi, G. Costantini, S. Fabris, F. Stadler, C. Kim, S. de Gironcoli, S. Baroni, e K. Kern  
*Templated growth of metal-organic coordination chains at surfaces*  
Angew. Chem. Int. Edit. 44, 6142 (2005)  
Selezionato come articolo-copertina per la sezione *Communications*  
ISSN:1433-7851; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1002/anie.200502007>
- 2 G. Fratesi, G.P. Brivio, e L.G. Molinari  
*Many-body method for infinite nonperiodic systems*  
Phys. Rev. B 69, 245113 (2004)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.69.245113>
- 1 G. Fratesi, G.P. Brivio, P. Rinke, e R.W. Godby  
*Image resonance in the many-body density of states at a metal surface*  
Phys. Rev. B 68, 195404 (2003)  
ISSN:1098-0121; DOI e URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.195404>

### Lavori sottoposti per pubblicazione:

- 1 G.Fratesi  
*Depolarization and bonding in quasi-one-dimensional Na structures on Cu(001)*  
Sottoposto a Phys. Rev. B

### Referee per riviste scientifiche:

- 1 *European Journal of Physics B*  
Edito da Springer, 233 Spring St., New York, NY 10013 USA
- 2 *Journal of Physics: Condensed Matter*  
Edito da IOP Publishing Ltd, Dirac House, Temple Back, Bristol BS1 6BE, England UK
- 3 *Physical Review Letters*  
Edito da American Physical Society, 1 Physics Ellipse, College PK, MD 20740-3844 USA

### Contributi orali a convegni:

- Lug 2010 14<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces, Tegernsee, Germania  
*Observation of charge redistribution during bond formation in one-dimensional alkali-metal wires.*
- Mar 2010 APS March Meeting 2010, Portland OR, US  
*Observation of charge redistribution during bond formation in one-dimensional alkali-metal wires.*

- Mar 2008 APS March Meeting 2008, New Orleans LA, US  
*Crucial electronic contributions to measures of surface diffusion by He atom scattering.*
- Sett 2007 12<sup>th</sup> NANOQUANTA-ETSF Workshop on Electronic Excitations, Aussois, Francia  
*CVV Auger spectra by first principles.*
- Sett 2005 Psi-K conference, Schwabisch Gmund, Germania  
*Low temperature methanol synthesis on transition metal surfaces.*
- Lug 2005 Theory@ELETTRA, Trieste, Italia  
*Low temperature methanol synthesis on transition metal surfaces.*
- Giu 2004 16<sup>th</sup> International Vacuum Congress, Venezia, Italia  
*Molecular self-assembly of trimesic acid on Cu(110) surfaces.*
- Giu 2004 INFMeeting, Genova, Italia  
*Molecular self-assembly of trimesic acid on Cu(110) surfaces.*
- Gen 2002 II Giornata di studio interazione molecola-superficie, Milano, Italia  
*Many-body properties of semi-infinite jellium.*
- 2002-2011 Varie comunicazioni poster (non dettagliate in questo curriculum).

### **Seminari su invito:**

- Giu 2011 Laboratorio Nazionale TASC, Trieste, Italia  
*Strain effect on electronic and structural properties of metal nanoislands grown on reconstructed Au(111)*
- Apr 2011 Department of Physics, University of Cambridge, Regno Unito  
*Strain effect on electronic and structural properties of metal nanoislands grown on reconstructed Au(111)*
- Dic 2008 Università degli Studi di Genova, Genova, Italia  
*Crucial electronic contributions to measures of surface diffusion by He atom scattering.*
- Apr 2008 Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste, Italia  
*Crucial electronic contributions to measures of surface diffusion by He atom scattering.*
- Feb 2008 Università degli Studi di Roma Tor Vergata, Roma, Italia  
*Crucial electronic contributions to measures of surface diffusion by He atom scattering.*
- Apr 2007 Università degli Studi di Milano-Bicocca, Milano, Italia  
*Low temperature methane to methanol conversion on transition metal surfaces - an ab initio study*  
Seminario per la Scuola di Dottorato in Scienza dei Materiali.
- Ott 2006 Department of Physics, University of Cambridge, Regno Unito  
*Low temperature methanol synthesis on transition metal surfaces.*
- Mar 2005 IRRMA, Lausanne, Svizzera  
*Molecular self-assembly of trimesic acid on Cu(110) surfaces.*
- Mar 2004 Università degli Studi di Milano-Bicocca, Milano, Italia  
*Molecular self-assembly of trimesic acid on Cu(110) surfaces*  
Seminario per la Scuola di Dottorato in Scienza dei Materiali.
- Sett 2003 Institute of Solid State Research, Juelich, Germania  
*Many-body approach to infinite non-periodic systems: application to the surface of semi-infinite jellium.*

### **Partecipazione a progetti di ricerca nazionali ed internazionali:**

- Mar 2010 *PRIN2008* su spettroscopia Auger di sistemi magnetici di bassa dimensionalità (finanziato dal - Sett 2012 MIUR).
- Mag 2009 *Progetto "IMMAGINA"* su interfacce e nanostrutture magnetiche (finanziato dalla Fondazione - Apr 2011 Cariplo).
- Gen 2008 *E-I3 action "I3-ETSF"* su spettroscopia teorica (finanziato dalla Unione Europea, FP7).  
- Giu 2011 Persona di contatto per il nodo di Milano-Bicocca.
- Gen 2006 *Network of Excellence "NANOQUANTA"* su spettroscopia teorica (finanziato dalla Unione - Mag 2008 Europea, con inizio a giugno 2004).
- Gen 2006 *PRIN2005* su spettroscopia in coincidenza (finanziato dal MIUR).  
- Dic 2007

### **Competenze linguistiche:**

Italiano, Inglese, Francese.

### **Competenze informatiche:**

Contributore allo sviluppo del pacchetto *Quantum ESPRESSO* (opEn Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation, and Optimization) per simulazioni di proprietà elettroniche e strutturali dei materiali.

Ottima conoscenza di Fortran77 e Fortran90.

Ottima conoscenza di Linux e di scripting (bash, awk). Amministratore di un cluster di calcolo e alcune macchine locali.

Buona conoscenza di Java; implementazione di applet per la soluzione di piccoli problemi di Fisica.

Buona conoscenza di calcolo parallelo e programmazione parallela. Partecipante alla scuola di calcolo parallelo del CINECA, Bologna, Italia, settembre 2004.

Buona conoscenza di Windows e di applicativi comuni (Word, Excel, PowerPoint).

Conoscenza base di C, C++, HTML, JavaScript, Python, Maple, Mathematica, Matlab.

### **Altro:**

- 2010 Collaborazione con il CNR-INFM CRS Democritos (Trieste) sul progetto "Fare Scienza con il Computer": sviluppo di programmi dimostrativi di calcolo scientifico per studenti delle scuole secondarie superiori.
- 2001 GRE Subject Test (Physics). Percentage Below: 87%.
- 1997 Finalista nazionale alle "Olimpiadi della Matematica" e alle "Olimpiadi della Fisica".

### **Referenze:**

- Dr. William Allison Cavendish Laboratory, Cambridge, UK, wa14@cam.ac.uk
- Prof. Gian Paolo Brivio Dip. Scienza dei Materiali, Università Milano-Bicocca, brivio@mater.unimib.it
- Prof. Stefano de Gironcoli Settore Stati Condensati, SISSA, Trieste, degironc@sissa.it
- Prof. Rex Godby Department of Physics, The University of York, UK, rwg3@york.ac.uk
- Prof. Giovanni Onida Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano, onida@mi.infn.it