

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera a) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, settore scientifico-disciplinare CHIM/02 - CHIMICA FISICA presso il Dipartimento di CHIMICA,

(avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 19 del 08/03/2022) Codice concorso 4958

Marco Cazzaniga

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI (NON INSERIRE INDIRIZZO PRIVATO E TELEFONO FISSO O CELLULARE)

COGNOME	CAZZANIGA
NOME	MARCO
DATA DI NASCITA	28/10/1981

TITOLI**TITOLO DI STUDIO**

14/07/2005 - Laurea in Fisica 110/110 cum laude
Curriculum di fisica della materia
Università degli Studi di Milano
Titolo della tesi: "Computation of electronic properties of metallic surfaces: total energy and quasiparticle excitations" – Relatore Prof. G. Onida

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO

22/12/2008 - Dottorato di Ricerca in Fisica Astrofisica e Fisica Applicata
Università degli Studi di Milano
Titolo della tesi: "Ab Initio approach to density response and excitation spectra in metallic systems" – Relatore Prof. G. Onida

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI

15/10/2020 – 14/10/2021 - Collaboratore (Co.Co.Co.)

Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano - Supervisore Prof. M. Ceotto

- Simulazioni di spettri IR di molecole adsorbite su TiO_2 .

01/03/2019 – 29/02/2020 - Collaboratore (Co.Co.Co.)

Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano - Supervisore Prof. M. Ceotto

- Simulazioni di proprietà vibrazionali di NO_x adsorbiti su TiO_2

01/09/2017 – 22/09/2018 (con sospensione di 22 gg) - Assegno di ricerca (art. 22 della Legge n. 240/2010)

Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano - Supervisore Prof. M. Ceotto

- Studio di proprietà vibrazionali di molecole adsorbite su superfici di titania attraverso metodi di dinamica semiclassica on-the-fly.

02/02/2015 – 01/08/2017 - Assegno di ricerca (art. 22 della Legge n. 240/2010)

Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari del CNR unità operativa di Milano – Supervisore Dr. D. Ceresoli

- Simulazioni Car-Parrinello per lo studio di processi di degradazione chimica in molecole organiche
- Simulazioni TDDFT/GW-BSE per il calcolo di spetti ottici di assorbimento e emissione in emettitori OLED
- Studio di meccanismi di formazione di ecciplessi in molecole organiche

01/11/2011 – 14/11/2013 (con sospensione di 14 gg) - Assegno di ricerca (art. 22 della Legge n. 240/2010)

Dipartimento di Fisica dell'Università degli Studi di Milano - divisione Central CAD and Design Solutions di STMicroelectronics in Agrate B.za – Supervisor Prof. V. Liberali e Dr. Ing. D. Pandini

- Studio degli effetti del substrato sulla Power Integrity
- Studio degli effetti del substrato sulle Emissioni Condotte

12/05/2011 – 11/06/2011 - Collaboratore (Co.Co.Co.)

Dipartimento di Fisica dell'Università degli Studi di Milano – Supervisore Prof. G. Onida

- Calcolo di proprietà elettroniche di interfacce di silicio idrogenato e silicio amorfo idrogenato

01/01/2009 – 31/12/2010 - Assegno di ricerca (art. 51, comma 6 della Legge n. 449/1997)

Dipartimento di Fisica dell'Università degli Studi di Milano – Supervisore Prof. G. Onida

- Simulazioni TDDFT e GW
- Studio di proprietà di quasiparticella in sistemi metallici
- Studio delle proprietà elettroniche del TiSe_2

DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI;

Partecipazione a scuole estive

- Scuola Estiva "Quantum Monte Carlo and the Casino Program X" - Vallico di Sotto (I) – 23-30 Luglio 2016.
- CECAM tutorial: "Excitations in Realistic Materials using Yambo on Massively Parallel Architectures" - CECAM Losanna (CH) 13-17 Aprile 2015.
- "Autumn school on numerical computing" - Caspur Roma (I) - 1-2 Ottobre 2012.
- "Corso base di Python per la programmazione in ambito scientifico" – CILEA Segrate (I) – 22-25 Marzo 2010.
- Scuola Estiva "Ab initio many body theory"; Universidad del Pais Vasco S. Sebastian (E) – 22-28 Luglio 2007.
- CECAM tutorial: "Electronic excitations and spectroscopies: Theory and codes" – CECAM Lione (F) - 11-15 Dicembre 2006.
- 15° Scuola Estiva di Calcolo Parallelo – CINECA, Casalecchio di Reno (I) – 3-14 July 2006.

PARTECIPAZIONI IN ATTIVITÀ PROGETTUALE

2017-2018 Assegnista presso l'Università degli Studi di Milano nell'ambito del progetto SEMICOMPLEX ERC-2014-CoG. Principal investigator Prof. Michele Ceotto.

2015-2017 Assegnista presso l'ISTM-CNR nell'ambito del progetto Samsung-GRO intitolato "Exciton- and polaron-induced OLED degradation by combined ab-initio molecular dynamics and experiments". Principal Investigator Dr. Davide Ceresoli.

2009-2010 Assegnista presso l'Università degli Studi di Milano nel nodo di Milano dell'European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF-e-I3) finanziato nell'ambito del FP7-Infrastructures. Referente del nodo Prof. Giovanni Onida.

GRANTS DI SUPERCALCOLO

A partire dal 2010 fino al 2021

Ruolo: External supervisor - Principal investigator per 10 Progetti Iskra di Classe C presso il CINECA

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

Partecipazione a svariate conferenze nazionali e internazionali con vari contributi sia poster che orali.
Presentazioni orali:

- Ab-initio simulations of exciplex formation - CECAM workshop "Multiscale modelling of organic semiconductors: from elementary processes to devices (Grenoble, F, 12-15 Settembre 2017).
- Ab-initio molecular dynamics simulation of polaron- and exciton-OLED degradation - Psi-K conference (Donostia-San Sebastian, E, 6-10 Settembre 2015).
- Ab initio many-body effects in TiSe₂ - FISMAT 2013 (Milano, I, 9-13 Settembre 2013).
- Ab initio many-body effects in TiSe₂: can GW describe an excitonic insulator? - SPLDS 2012 (Pont-à-Mousson, F, 29 Maggio – 1 giugno 2012).
- Ab initio many-body effects in TiSe₂ - ETSF Workshop on Electronic Excitations: Bridging theory and experiment (Torino, I, 27-30 Settembre 2011).
- Ab initio long-wavelength properties of metallic system: iron and magnesium - EPIOPTICS-11 (Erice, I, 19-25 Luglio 2010).
- Ab-initio long wavelength dielectric properties of bulk iron - ETSF Workshop on Electronic Excitations: Ab-initio tools for the characterization of nanostructures (Evora, P, 14-19 Settembre 2009).
- Ab-initio GW self-energy corrections in metallic systems - 4th ABINIT developer workshop (Autran, F, 24-27 Marzo 2009).
- The dynamic structure factor for simple metals: a study of the electronic correlation of solids - 13 Nanoquanta-ETSF Workshop on Electronic Excitations: Theoretical spectroscopies and quantum transport (Pugnochiuso, I, 22-27 Settembre 2008).
- The dynamic structure factor for simple metals: a study of the electronic correlation of solids - EPIOPTICS-10 (Erice, I, 21-26 Giugno 2008).
- The dynamic structure factor for simple metals: a study of the electronic correlation of solids - 5th Nanoquanta Young Researchers' meeting (Modena, I, 20-23 Maggio 2008).
- Study of the small-q contribution to the polarizability and the intra-band term: from the jellium to the periodic solid - 4th Nanoquanta Young Researchers' meeting (Donostia-San Sebastian, E, 15-18 Maggio 2007).

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

Articoli su rivista:

- Advancing Near-Infrared Phosphorescence with Heteroleptic Iridium Complexes Bearing a Single Emitting Ligand: Properties and Organic Light-Emitting Diode Applications, M. Penconi, A. B. Kojima, M.-C. Jung, M. Cazzaniga, C. Baldoli, D. Ceresoli, M. E. Thompson, and A. Bossi, *Chem. Mater.* 34, 574 (2022) DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c03030>
- Anharmonic calculations of vibrational spectra for molecular adsorbates: a divide-and-conquer semiclassical molecular dynamics approach, M. Cazzaniga, M. Micciarelli, F. Moriggi, A. Mahmoud, F. Gabas, and M. Ceotto, *J. Chem. Phys.* 152, 104104 (2020) DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5142682>
- Ab initio many-body perturbation theory calculations of the electronic and optical properties of cyclometalated Ir(III) complexes, M. Cazzaniga, F. Cargnoni, M. Penconi, A. Bossi, and D. Ceresoli, *J. Chem. Theory Comput.* 16, 1188 (2020) DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00763>
- Unraveling the degradation mechanism of FIrpic-based blue OLEDs: I. a theoretical investigation, M. Cazzaniga, F. Cargnoni, M. Penconi, A. Bossi, and D. Ceresoli, *Chem. Mater.* 31, 2269 (2019) DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b04501>
- Unraveling the degradation mechanism in FIrpic-based blue OLEDs: II. trap and detect molecules at the interfaces, M. Penconi, M. Cazzaniga, W. Panzeri, A. Mele, F. Cargnoni, D. Ceresoli, and A. Bossi, *Chem. Mater.* 31, 2277 (2019) DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b04502>
- β -diketonate ancillary ligands in heteroleptic iridium complexes: a balance between synthetic advantages and photophysical troubles, M. Penconi, M. Cazzaniga, S. Kesarkar, C. Baldoli, P. R. Mussini, D. Ceresoli, and A. Bossi, *Photochem. Photobiol. Sci.* 17, 1169 (2018) DOI: <https://doi.org/10.1039/C8PP00052B>
- π - π -Induced aggregation and single-crystal fluorescence anisotropy of 5,6,10b-triaza-acephenanthrylene, K. Ostrowska, D. Ceresoli, K. Stadnicka, M. Gryl, M. Cazzaniga, R. Soave, B. Musielak, Ł. J. Witek, P. Goszczycki, J. Grolik and A. M. Turek, *IUCrJ* 5, 335 (2018) DOI: <https://doi.org/10.1107/S2052252518001987>
- Upper limit to the ultimate achievable emission wavelength in near-IR emitting cyclometalated Iridium complexes, M. Penconi, M. Cazzaniga, S. Kesarkar, P. R. Mussini, D. Ceresoli, and A. Bossi, *Photochem. Photobiol. Sci.* 16, 1220 (2017) DOI: <https://doi.org/10.1039/C7PP00119C>
- Near-IR emitting Ir(III) complexes with heteroaromatic β -diketonate ancillary ligands for efficient solution processed OLEDs: structure-property correlations, S. Kesarkar, W. Mróz, M. Penconi, M. Pasini, S. Destri, M. Cazzaniga, D. Ceresoli, P. R. Mussini, C. Baldoli, U. Giovannella, and A. Bossi, *Angewandte Chemie Int. Ed.* 55, 2714 (2016) DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201509798>
- Atomistic study of the structural and electronic properties of a-Si:H/c-Si interfaces, I. Santos, M. Cazzaniga, G. Onida, and L. Colombo, *J. Phys.: Condens. Matter* 26, 095001 (2014) DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/9/095001>
- Comment on "Charge-density wave and superconducting dome in TiSe₂ from electron-phonon interaction", V. Olevano, M. Cazzaniga, M. Ferri, L. Caramella, and G. Onida, *Phys. Rev. Lett.* 112, 049701 (2014) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.049701>
- GW and beyond approaches to quasiparticle properties in metals, M. Cazzaniga, *Phys. Rev. B* 86, 035120 (2012) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.035120>
- Ab initio many-body effects in TiSe₂: a possible excitonic insulator scenario from GW band-shape renormalization, M. Cazzaniga, H. Cercellier, M. Holzmann, C. Monney, P. Aebi, G. Onida, and V. Olevano, *Phys. Rev. B* 85, 195111 (2012) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.195111>
- Dynamical response function in sodium and aluminum from time-dependent density-functional theory, M. Cazzaniga, H.-Ch. Weissker, S. Huotari, T. Pykkänen, P. Salvestrini, G. Monaco, G. Onida, and L. Reining, *Phys. Rev. B* 84, 075109 (2011) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075109>
- Dynamical response function in sodium studied by inelastic x-ray scattering spectroscopy, S. Huotari, M. Cazzaniga, H.-Ch. Weissker, T. Pykkänen, H. Müller, L. Reining, G. Onida, and G. Monaco, *Phys. Rev. B* 84, 075108 (2011) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075108>
- Implementation of techniques for computing optical properties in 0-3 dimensions, including a real-space cutoff, in ABINIT, C. Motta, M. Giantomassi, M. Cazzaniga, K. Gaál-Nagy, and X. Gonze, *Comp. Mat. Sci.* 50, 698 (2010) DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2010.09.036>
- Ab initio intraband contributions to the optical properties of metals, M. Cazzaniga, L. Caramella, N. Manini, and G. Onida, *Phys. Rev. B* 82, 035104 (2010) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.035104>

• Dynamic structure factor and dielectric function of silicon for finite momentum transfer: inelastic x-ray scattering experiments and ab initio calculations, H.-Ch. Weissker, J. Serrano, S. Huotari, E. Luppi, M. Cazzaniga, F. Bruneval, F. Sottile, G. Monaco, V. Olevano, and L. Reining, Phys. Rev. B 81, 085104 (2010) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.085104>

• Ab-initio self-energy corrections in systems with metallic screening, M. Cazzaniga, N. Manini, L. G. Molinari, and G. Onida, Phys. Rev. B 77, 035117 (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.035117>

Conference proceedings:

• Evaluating the impact of substrate noise on conducted EMI in automotive microcontrollers, M. Cazzaniga, P. Joubert Doriol, A. Sanna, E. Blanc, V. Liberali, and D. Pandini, Proceedings of 9th International Workshop on Electromagnetic Compatibility of Integrated Circuits (EMC Compo 2013), p. 129.

• Evaluating the impact of substrate on power integrity in industrial microcontrollers, M. Cazzaniga, P. Joubert Doriol, E. Blanc, V. Liberali, and D. Pandini, Proceeding of 23rd International Workshop on Power And Timing Modeling, Optimization and Simulation (PATMOS 2013), p. 107.

• Ab initio long-wavelength properties of metallic systems: iron and magnesium, M. Cazzaniga, L. Caramella, N. Manini, P. Salvestrini, and G. Onida, Epiotics-11, Proceedings of the 49th Course of the International School of Solid State Physics, Editor A. Cricenti, p. 30, World Scientific (2012).

• The dynamic structure factor of simple metals: a study of the electronic correlation in solids M. Cazzaniga, H.-Ch. Weissker, S. Huotari, T. Pykkänen, G. Monaco, L. Reining, and G. Onida, Epiotics-10, Proceedings of the 43rd Course of the International School of Solid State Physics, Editor A. Cricenti, p. 55, World Scientific (2010).

Data

21/03/2022

Luogo

Besana in Brianza