



**AL MAGNIFICO RETTORE
DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO**

COD. ID: 5532

Il sottoscritto chiede di essere ammesso a partecipare alla selezione pubblica, per titoli ed esami, per il conferimento di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Fisica Aldo Pontremoli.

Responsabile scientifico: Prof. Alessio Zaccone

[Anthony Impellizzeri]

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

Cognome	Impellizzeri
Nome	Anthony

OCCUPAZIONE ATTUALE

Incarico	Struttura
Docente	Liceo Virgilio Milano

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Titolo	Corso di studi	Università	anno conseguimento titolo
Laurea Magistrale o equivalente	Fisica	Università degli studi di Catania	24/11/2016
Specializzazione			
Dottorato Di Ricerca	Fisica	Università di Nantes	15/12/2020
Master			
Diploma Di Specializzazione Medica			
Diploma Di Specializzazione Europea			
Altro			

ISCRIZIONE AD ORDINI PROFESSIONALI

Data iscrizione	Ordine	Città



LINGUE STRANIERE CONOSCIUTE

lingue	livello di conoscenza
Inglese	C1
Francese	B1

PREMI, RICONOSCIMENTI E BORSE DI STUDIO

anno	Descrizione premio

ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA

La mia attività di ricerca si fonda sull'analisi computazionale delle proprietà elettroniche, vibrazionali e di trasporto di strutture a bassa dimensionalità (D), quali: carbonio, hexagonal boron-nitride (hBN), fosforo e difluoruro di Magnesio (MgF_2):

- 3D: grafite, bulk hBN, fosforo (nero, bianco, rosso, viola);
- 2D: mono-, bi-layers, tri-layers;
- 1D: nanotubi e nanoribbons;
- 0D: fullerene;
- ibride: nanotubi collassati.

Le varie proprietà elettroniche (struttura a bande, densità degli stati totale e proiettata sugli atomi, analisi delle cariche di Mulliken e di Bader, barriere energetiche), vibrazionali (frequenze, modi vibrazionali, tensori ed intensità Raman), di trasporto (trasmissione elettrica, resistenza elettrica, intensità di corrente mediante le funzioni di Green) sono state investigate mediante la teoria del funzionale della densità, avvalendosi dei seguenti pacchetti softwares: Atomistix Tool-kit (ATK), Ab-initio Modelling Programm (AIMPRO), e Quantum-Espresso.

Diverse approssimazioni sono state adottate per il funzionale di scambio e di correlazione: Local Density Approximation (LDA), Generalized Gradient Approximation (GGA) con la parametrizzazione di Perdew-Burke-Ernherzof (PBE) includendo le forze di van der Waals tramite lo schema di Grimme, i funzionali ibridi PBE0, rev-PBE e HSE06.

Il Master project verteva sull'analisi della variazione della resistenza elettrica ai bordi del grafene ricoperto da strati di hBN a seguito dell'interazione con gas di molecole polari (vapor acqueo H_2O , ammoniaca NH_3 , diossido di azoto NO_2). Tramite il suddetto progetto si è appreso come simulare le proprietà elettroniche e le proprietà di trasporto di sistemi fuori dall'equilibrio usando il formalismo di Landauer-Buttiker in combinazione con la funzione di Green (versione ritardata).

Il PhD project verteva sull'indagine sia teorica sia sperimentale di strutture di carbonio con dimensionalità ibrida tra nanotubi (1D) e bilayers (2D), noti come nanotubi collassati. Gli obiettivi del progetto:

(i) comprendere la stabilità dei suddetti nanotubi al variare del diametro.

(ii) La transizione di fase elettronica metallo-semiconduttore a seguito della variazione geometrica.

(iii) Analogie e differenze in termini dello spettro Raman tra nanotubi con sezione circolare e collassata tramite il calcolo della funzione dielettrica e delle intensità Raman al variare della frequenza di



eccitazione. Quest'ultime sono state determinate mediante l'implementazione dell'approssimazione semi-classica di Placzek. L'implementazione della suddetta approssimazione ha richiesto l'uso combinato del pacchetto software DFT AIMPRO (ottimizzazione della geometria delle nanostrutture, calcolo della funzione dielettrica) e codici Python (creazione delle coordinate traslate lungo le tre direzioni dello spazio, calcolo dei tensori Raman e delle intensità Raman di scattering al variare della lunghezza d'onda di eccitazione). I suddetti risultati computazionali sono stati supportati dalla controparte sperimentale mediante: spettroscopia Raman polarizzata, cartografia Raman, microscopio a forza atomica (AFM), microscopio a trasmissione elettronica (TEM).

(iv) Analisi della stabilità energetica e delle proprietà di nanotubi collassati con cavità riempite da varie tipologie di molecole da usare per l'implementazione di una nuova generazione di *field-effect transistors (FETs)*.

Il Post-doc project verteva sull'analisi delle proprietà di superficie di cristalli, tipo il difluoruro di Magnesio (MgF_2) a seguito dell'esposizione con gas di fluoro per applicazione di fotocatalisi.

Tutte le simulazioni teoriche sono state svolte mediante l'ausilio di super-computers (machine clusters): Calculus, JAWS. Al fine di ottimizzare il raggiungimento dei risultati, le simulazioni sono state sempre state lanciate in serie mediante l'implementazione di codici BASH sul terminale/prompt dei comandi.

ATTIVITÀ PROGETTUALE

Anno	Progetto
2016-2017	Master Project: Experimental and theoretical investigation of properties of hBN/Graphene/hBN heterostructures
2017-2020	PhD project: Density functional modeling of filled collapsed carbon nanotubes (Edge Filler project)
2021-2022	Post-doc project: Experimental and theoretical investigation of Organized Porous Inorganic Fluorides (OPIFCAT project)

TITOLARITÀ DI BREVETTI

Brevetto

CONGRESSI, CONVEGNI E SEMINARI

Data	Titolo	Sede
2020	CMD2020GEFS, Impact of mechanical deformation on the electronic properties of 2D nanomaterials.	Nantes (FR) (telematica)
2020	NanoteC20, Encapsulated phosphorus packings in single-walled carbon nanotube: a Raman spectroscopy investigation.	Nantes (FR) (telematica)



2019	SFEC19, Modelisation des nanotubes de carbone dogbones avec techniques ab initio.	Samatan (FR)
2019	SFP19, Selective edge filling of collapsed carbon nanotubes for nanoelectronics: an ab-initio study.	Nantes (FR)
2019	Chem2DMat, Selective edge filling of collapsed carbon nanotubes for field effect transistors.	Dresden (DE)
2018	NanoteC18, Phase transition and charge density in filled collapsed carbon nanotubes: an ab-initio study.	Brighton (UK)
2018	ChemOnTubes, Determination of phase transition in filled collapsed carbon nanotubes: a first-principle investigation.	Biarritz (FR)

PUBBLICAZIONI

Libri
[titolo, città, editore, anno...]
[titolo, città, editore, anno...]
[titolo, città, editore, anno...]

Articoli su riviste
1) <u>A. Impellizzeri</u> , M. Amato, A. Zobelli, and C.P. Ewels, <i>The Electronic Structure of Folded Hexagonal Boron Nitride</i> , J. Phys. Chem. C, 2022, 126 (41), 17746-17752
2) D.V. Rybkovskiy, V. O. Koroteev, <u>A. Impellizzeri</u> , A. A. Vorfolomeeva, E. Yu. Gerasimov, A. V. Okotrub, A. Chuvilin, L. G. Bulusheva, and C.P. Ewels, <i>“Missing”-One Dimensional Red-Phosphorus Chains Encapsulated within Single-Walled Carbon Nanotubes</i> , ACS Nano, 2022, 16 (4), 6002-6012
3) A. C. Torres-Dias, <u>A. Impellizzeri</u> , E. Picheau, L. Noé, A. Pénicaud, C.P. Ewels, and M. Monthieux, <i>Asymmetrical Cross-Sectional Buckling in Arc-Prepared Multi-Wall Carbon Nanotubes Revealed by Iodine Filling</i> , C, 2022, 8 (1), 10
4) J. McHugh, P. Mouratidis, <u>A. Impellizzeri</u> , K. Jolley, D. Erbahar, C.P. Ewels, <i>Prismatic Edge Dislocations in Graphite</i> , Carbon, 2019, 401-419
5) F. Hof, <u>A. Impellizzeri</u> , E. Picheau, X. Che, A. Pénicaud and C.P. Ewels, <i>Chainlike Structure Formed in Iodine Monochloride Graphite Intercalation Compounds</i> , J. Chem. Phys. C, 2021, 125 (42), 23383-23389
6) <u>A. Impellizzeri</u> , A. A. Vorfolomeeva, N. V. Surovtsev, A. V. Okotrub, C.P. Ewels and D.V. Rybkovskiy, <i>Simulated Raman spectra of bulk and low-dimensional phosphorus allotropes</i> , Phys. Chem. Chem. Phys. 2021, 23 (31), 16611-16622



- 7) S. D. Silva Santos, A. Impellizzeri, A. L. Aguiar, C. Journet, C. Dalverny, B. Toury, J. M. De Sousa, C.P. Ewels and A. San-Miguel, *High Pressure in Boron Nitride Nanotubes for Kirigami Nanoribbon Elaboration*, J. Chem. Phys. C, 2021, 125 (21), 11440-11453
- 8) A. Impellizzeri, *Atomic-scale Modelling of Folding and Filling in 2D Nanostructures*, PhD thesis 2020, Nantes Université
- 9) E. Picheau, A. Impellizzeri, D.V. Rybkovskiy, M. Bayle, J.-Y. Mevellec, F. Hof, H. Saadaoui, L. Noé, A. C. Torres-Dias, J.-L. Duvail, M. Monthieux, B. Humbert, P. Puech, C.P. Ewels and A. Pénicaud, *Intense Raman D Band without Disorder in Flattened Carbon Nanotubes*, ACS Nano, 2021, 15 (1), 596-603
- 10) A. Impellizzeri, P. Briddon, and C.P. Ewels, *Stacking- and chirality-dependent collapse of single-walled carbon nanotubes: A large-scale density functional study*, Phys. Rev. B, 2019, 100 (11), 115410
- 11) D.V. Rybkovskiy, A. Impellizzeri, C.P. Ewels, and E.D. Obraztsova, *Polyiodide structures in thin single-walled carbon nanotubes: A large-scale density functional study*, Carbon, 2019, 142, 123-130
- 12) A. Yaya, A. Impellizzeri, F. Massuyeau, J.-L. Duvail, P. Briddon, and C.P. Ewels, *Mapping the stacking interaction of Triphenyl vinylene oligomers with graphene and carbon nanotubes*, Carbon, 2019, 141, 274-282
- 13) J.M. Caridad, G. Calogero, P. Pedrinazzi, J.E. Santos, A. Impellizzeri, T. Gunst, T.J. Booth, R. Sordan, P. Boggild, and M. Brandbyge, *A Graphene-Edge Ferroelectric Molecular Switch*, Nano Letters, 2018, 18 (8), 4675-4683

Atti di convegni

ALTRE INFORMAZIONI

Competenze acquisite:

- 1) Master project: modellare nanostrutture di carbonio; effettuare simulazioni di DFT (livelli di approssimazione: LDA, LDA+BSSE, GGA-PBE, GGA-PBE+D2, GGA-PBE+D3, rev-PBE), DFTB in combinazione con il formalismo della funzione di Green (versione ritardata) per ottimizzare le strutture geometriche. Calcolo delle proprietà elettroniche (struttura a bande, densità degli stati totale e locale, distribuzione di carica e del potenziale elettrostatico, resistenza elettrica, energia di legame). Implementazione di codici python per simulare le condizioni al contorno di Dirichlet e di Neumann per sistemi capacitivi: graphene-dielettrico.
- 2) PhD project: Implementazione di codici python per creare nanotubi di carbonio circolari e collassati e nanoconi; effettuare simulazioni di DFT (livelli di approssimazione: PBE0, HSE06). Simulare il processo di deformazione dei nanotubi di carbonio usando la dinamica molecolare. Calcolo delle barriere energetiche tra due o più configurazioni, delle proprietà vibrazionali. Implementazione di un codice python della teoria semi-classica di Placzek per simulare gli spettri Raman al fine di fornire un supporto complementare dei risultati ottenuti sperimentalmente. Simulazione di immagini di microscopio a trasmissione elettronica (TEM).
- 3) Post doc project: Implementazione di un codice python per creare strutture 2D partendo da strutture cristalline 3D in funzione delle differenti direzioni cristallografiche.

Linguaggi di programmazione: C++, Fortran, Python, Bash-Tcsh, ASE.



Pacchetti software: Atomistix Tool Kit (ATK), Ab Initio Modelling Program (AIMPRO), QuantumEspresso.

Programmi di visualizzazione delle nanostrutture: Jmol, Avogadro, VESTA.

Programmi per analisi dati: Gnuplot, Root, Mathematica, Wolphram Alpha.

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del DPR n. 445/2000.

Il presente curriculum, non contiene dati sensibili e dati giudiziari di cui all'art. 4, comma 1, lettere d) ed e) del D.Lgs. 30.6.2003 n. 196.

RICORDIAMO che i curricula **SARANNO RESI PUBBLICI sul sito di Ateneo** e pertanto si prega di non inserire dati sensibili e personali. Il presente modello è già precostruito per soddisfare la necessità di pubblicazione senza dati sensibili.

Si prega pertanto di **NON FIRMARE** il presente modello.

Luogo e data: Monza, 11/12/2022