

Curriculum Vitae et Studiorum

Ottobre 2023

Luca Bursi, PhD

Dipartimento di Fisica, Informatica e Matematica, Università di Modena e Reggio Emilia,
& Istituto Nanoscienze, Consiglio Nazionale delle Ricerche, CNR-NANO-S3,
via Campi 213/A, 41125, Modena, Italy

E-mail: luca.bursi@unimore.it , luca.bursi@nano.cnr.it

INFORMAZIONI PERSONALI

Data e luogo di nascita: 23 ottobre 1988, Scandiano (RE), Italia

Nazionalità: Italiana Genere: M

ESPERIENZA NELLA RICERCA

- Febbraio 2023 – in corso: **Ricercatore RTDa**
Dipartimento di Fisica, Informatica e Matematica (FIM), Università di Modena e Reggio Emilia, via Campi 213/A, 41125, Modena, Italia.
- Aprile 2022 – febbraio 2023: **Ricercatore Postdoc “Senior”**
Istituto Nanoscienze, Consiglio Nazionale delle Ricerche, CNR-NANO-S3, via Campi 213/A, 41125, Modena, Italia. Progetto europeo OPEN MODEL
Supervisore: Dr. Arrigo Calzolari
- Agosto 2020 – marzo 2022: **Ricercatore Postdoc “Senior”**
Istituto Nanoscienze, Consiglio Nazionale delle Ricerche, CNR-NANO-S3, via Campi 213/A, 41125, Modena, Italia. Progetto europeo INTERSECT
Supervisore: Dr. Arrigo Calzolari
- Agosto 2020 – luglio 2021: **Ricercatore “in visita”**
Department of Physics, University of North Texas (UNT), Denton, TX 76203, USA
Supervisore: Prof. Oliviero Andreussi
- Maggio 2019 – luglio 2020: **Ricercatore Postdoc**
Department of Physics, University of North Texas (UNT), Denton, TX 76203, USA
Supervisore: Prof. Oliviero Andreussi
- Maggio 2017 – maggio 2019: **Ricercatore Postdoc**
Department of Physics and Astronomy & Laboratory for Nanophotonics,
Rice University, 6100 Main St., Houston, TX 77005, USA
Supervisore: Prof. Peter Nordlander
- Ottobre 2015 – febbraio 2016: **Ricercatore “in visita”**
Laboratory for Nanophotonics, Rice University, Houston, TX 77005, USA
Supervisore: Prof. Peter Nordlander
- Gennaio 2014 – marzo 2017: **Studente di Dottorato**
Dipartimento di Fisica, Informatica e Matematica, Università di Modena e Reggio Emilia e Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3, Modena, Italia
Supervisori: Prof. Stefano Corni, Dr. Arrigo Calzolari, Prof. Elisa Molinari

FORMAZIONE

- Marzo 2017: **Dottorato in Physics and Nano Sciences** (con Lode)
Dipartimento di Fisica, Informatica e Matematica, Università di Modena e Reggio Emilia e Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3, Modena, Italia
Tesi: Metodi quantitativi per la determinazione del carattere plasmonico delle eccitazioni ottiche alla nanoscala.
Supervisor: Prof. Stefano Corni, Dr. Arrigo Calzolari, Prof. Elisa Molinari
- Ottobre 2013: **Laurea Magistrale in Fisica** (con Lode)
Università di Modena e Reggio Emilia, Modena, Italia
Tesi: Nanosistemi π -coniugati a base di carbonio: eccitazioni ottiche ed effetti di taglia.
Supervisor: Dr. Arrigo Calzolari, Prof. Stefano Corni, Prof. Elisa Molinari
- Ottobre 2010: **Laurea Triennale in Fisica** (con Lode)
Università di Modena e Reggio Emilia, Modena, Italia
Tesi: Studio a principi primi della superficie (111) del rame.
Supervisor: Dr. Carlo Cavazzoni, Prof. Giorgio Santoro
- Maggio 2010: **Studente in visita** (Maggio – luglio 2010)
Centro di Supercalcolo CINECA, Bologna, Italia
Supervisore: Dr. Carlo Cavazzoni

INTERESSI DI RICERCA

I miei interessi di ricerca si concentrano sull'affrontare sfide scientifiche che combinano, da un lato, problemi aperti fondamentali nella fisica della materia condensata, nella scienza dei materiali, nella plasmonica e nella nanofotonica, con l'obiettivo di fare, dall'altro lato, innovazione tecnologica attraverso l'esplorazione e/o la personalizzazione di materiali alternativi o nanostrutture per applicazioni specifiche. Questo include l'indagine delle proprietà elettroniche e ottiche di materiali allo stato solido, nanostrutture, complessi molecolari e sistemi complessi (ad esempio, contenenti difetti, disordinati, policristallini, amorfi, ecc.) utilizzando e, a volte, integrando tecniche atomistiche *ab initio* allo stato dell'arte, basate sulla meccanica quantistica e, in particolare, sulla teoria del funzionale densità (DFT), DFT dipendente dal tempo e oltre e/o workflows semi-automatici di tipo high-throughput. Inoltre, mi occupo della modellizzazione di processi catalitici ed elettrochimici su interfacce solvate mediante l'utilizzo di schemi avanzati di solvatazione implicita, basati sulla DFT, espressamente concepiti per simulare efficacemente sistemi di materia condensata. Infine, conduco attività di modellizzazione computazionale, caratterizzazione e ingegnerizzazione di nanostrutture plasmoniche, tra le altre, attraverso l'uso di tecniche avanzate di simulazione numerica multi-fisica e multi-scala, basate su modelli continui, soprattutto inerenti all'elettrodinamica classica.

FINANZIAMENTI OTTENUTI

- Dicembre 2018: 2018 “Innovative Collaborative Grant Award” (\$10000)
Department of Nanomedicine, Houston Methodist e Rice University
Progetto intitolato: *Dispositivo impiantabile in modalità continua per il rilevamento e il trattamento in fase iniziale dello stato infiammatorio causato da qualsiasi corpo estraneo impiantato.*
- 2013 – in corso: 7 progetti IS CRA per l'accesso a risorse di supercalcolo presso il CINECA di Bologna (6 come “PI”; 1 come “Co-PI”).

PUBBLICAZIONI E COMUNICAZIONI SCIENTIFICHE

Coautore di 14 pubblicazioni su riviste internazionali “peer-reviewed” (2 come primo autore). Citazioni: 464 su Google Scholar, 362 su Scopus; h-index: 11 su Google Scholar e su Scopus (6 ottobre 2023). ID come autore su ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-4530-0424>. ID come autore su Scopus: 56575141100. Le comunicazioni scientifiche includono 3 seminari su invito, 11 contributi orali e 14 contributi sotto forma di poster in più di 22 conferenze internazionali; più 4 contributi orali e 4 sotto forma di poster accettati in 3 conferenze internazionali poi annullate nel 2020.

BREVE DESCRIZIONE DELL'ATTIVITÀ DI RICERCA

Durante la mia tesi di laurea e il dottorato di ricerca presso l'**Università di Modena e Reggio Emilia e l'Istituto Nanoscienze del Consiglio Nazionale delle Ricerche, CNR-NANO-S3, sede di Modena**, svolti sotto la supervisione congiunta del Prof. Stefano Corni, del Dott. Arrigo Calzolari e della Prof.ssa Elisa Molinari, la mia attività di ricerca si è concentrata sull'introduzione, sviluppo e implementazione di approcci microscopici originali progettati per **quantificare**, nello specifico, **il carattere plasmonico delle eccitazioni ottiche in nanostrutture** di piccole dimensioni. Ciò ha comportato sia la riformulazione a livello microscopico di concetti già esistenti, come l'aumento di intensità del campo elettrico dovuto all'effetto plasmonico [1], sia l'introduzione di nuove quantità, o descrittori, basati su rigorose derivazioni teoriche, chiamati “indici di plasmonicità” [3,4]. Tali approcci forniscono strumenti semplici e fisicamente validi per l'identificazione di eccitazioni plasmoniche, a partire dalle simulazioni delle proprietà ottiche dei nanosistemi. Gli indici di plasmonicità sono stati implementati in metodi atomistici a principi primi basati sulla teoria del funzionale densità dipendente dal tempo (TDDFT) [3], in descrizioni di tipo “jellium” a simmetria sferica di nanoparticelle e nell'elettrodinamica classica [4]. Sono stati applicati per analizzare il comportamento plasmonico di nanocluster metallici e semiconduttori, molecole prototipo a base di carbonio, sistemi ibridi paradigmatici, nonché nanosfere descritte all'interno del modello “jellium” e nanoparticelle più grandi modellate attraverso l'elettrodinamica classica [3,4,5,10]. Ho eseguito le simulazioni DFT e TDDFT a principi primi sui sistemi studiati con i codici informatici Quantum Espresso (QE), Gaussian e GAMESS e ho implementato gli approcci degli indici di plasmonicità come codici paralleli “post-processing” che sfruttano direttamente i files prodotti in output da QE e GAMESS. In particolare, la referenza [4] è il risultato di una collaborazione internazionale tra alcuni gruppi pionieri nella nanoplasmonica “quantistica”: il gruppo del Prof. P. Nordlander alla Rice University, Houston, TX, USA, che ho visitato durante il mio dottorato, il gruppo del Prof. F. J. García de Abajo presso ICFO, Barcelona Institute of Science and Technology, Barcelona, Spagna, il gruppo di E. A. Carter presso la Princeton University, Princeton, NJ, U.S.A., e io e i miei supervisori presso l'Università di Modena e Reggio Emilia e CNR-NANO-S3, Modena.

Ho continuato a lavorare sull'identificazione delle eccitazioni plasmoniche in nanostrutture di dimensioni quasi-molecolari e molecolari durante il mio postdoc nel **gruppo del Prof. Peter Nordlander alla Rice University, Houston, Texas, USA**. In particolare, in collaborazione con il gruppo sperimentale della Prof.ssa Naomi J. Halas, sempre alla Rice University, abbiamo studiato le **dinamiche di diseccitazione degli stati eccitati di plasmoni molecolari in selezionati idrocarburi policiclici aromatici**, nelle loro configurazioni cariche e neutre, con particolare attenzione ai percorsi di diseccitazione, e abbiamo studiato a livello teorico il loro carattere collettivo [5,10]. Ho eseguito le simulazioni DFT e TDDFT a principi primi principalmente con i codici informatici GAUSSIAN e GAMESS.

Allo stesso tempo, sotto la supervisione del Prof. Nordlander e in collaborazione con il Prof. Alessandro Alabastri e il gruppo del Prof. Stephan Link alla Rice University, ho utilizzato simulazioni elettromagnetiche a elementi finiti, o “Finite Element Method” (FEM), implementate nel software commerciale COMSOL Multiphysics, per modellare la **risposta ottica chirale di singole nanoantenne ai particolari stati di polarizzazione delle onde elettromagnetiche ottenibili alle interfacce**. Più specificamente, abbiamo osservato una

modulazione particolarmente intensa della diffusione della luce visibile da nanoantenne d'oro semicircolari e di tipo "pinwheel" eccitate attraverso la riflessione interna totale della luce polarizzata circolarmente (destrorsa e sinistrorsa), sfruttando le peculiari proprietà di polarizzazione delle onde evanescenti [6]. È stato dimostrato che tali proprietà sono necessarie per ottenere risposte intense dipendenti dalla polarizzazione e le simulazioni elettromagnetiche FEM concordano molto bene con le misure sperimentali. Questi risultati dimostrano un nuovo meccanismo fondamentale per le risposte ottiche di strutture chirali che richiedono un ritardo di fase tra le oscillazioni del campo elettrico trasversale e longitudinale, non riscontrato nella luce che si propaga nello spazio libero. Il dicroismo circolare tradizionale richiede, infatti, la sensibilità strutturale alla differenza di fase relativa tra le oscillazioni del campo trasversale. Abbiamo quindi studiato tale nuovo meccanismo fondamentale dimostrando la sensibilità intrinseca della materia alla direzione del campo trocoidale e abbiamo chiamato questa proprietà "**dicroismo trocoidale**" [9]. Abbiamo, quindi, osservato il dicroismo trocoidale nell'eccitazione dei modi plasmonici, "bonding" e "antibonding" per un sistema composto da due dipoli accoppiati. Il dicroismo trocoidale costituisce una base geometrica per la sensibilità alla polarizzazione della luce che differisce fondamentalmente dal dicroismo lineare e circolare.

In seguito, abbiamo indagato lo **scattering differenziale di pinwheel plasmoniche chirali con simmetria di rotazione quando vengono irradiati in modo asimmetrico con luce polarizzata linearmente** [14]. Nonostante la loro elevata simmetria rotazionale, osserviamo uno scattering differenziale lineare sostanziale che si mantiene in tutte le orientazioni delle pinwheel. Dimostriamo che questo scattering differenziale lineare indipendente dall'orientamento deriva dalla rottura delle simmetrie di riflessione e di rotazione nella nostra geometria sperimentale complessiva. I nostri risultati sottolineano la necessità di considerare sia la simmetria rotazionale della nanoantenna, che l'allestimento sperimentale, compresa la direzione e l'angolo di illuminazione, durante la caratterizzazione ottica chirale amplificata dagli effetti plasmonici. I nostri risultati evidenziano le strutture spettroscopiche caratteristiche di un effetto analogo alla chiralità estrinseca per polarizzazioni lineari.

Ho anche contribuito a due progetti in collaborazione con il gruppo sperimentale della Prof.ssa Halas alla Rice University, in cui è stata studiata e caratterizzata la **crescita di nanocristalli e nanocubi di alluminio, essenzialmente controllate dalla scelta del solvente di reazione** insieme al tempo di reazione e alla temperatura [7,8]. In particolare, ho calcolato gli spettri di assorbimento ottico, a principi primi a livello TDDFT, di diversi composti Ti-Al in diversi solventi (impliciti), mediante i codici QE e GAUSSIAN, che, insieme ad altre simulazioni teoriche indipendenti, hanno supportato le analisi e conclusioni sperimentali.

Più in particolare, attraverso un'attenta analisi della sintesi colloidale di nanocristalli di alluminio attraverso spettroscopie EPR e ^1H NMR, un meccanismo per le reazioni mediante il quale **l'isopropossido di titanio (IV) $\text{Ti}(\text{OiPr})_4$ media la polimerizzazione di AlH_3 in nanocristalli di alluminio** è stato scoperto, in primo luogo. AlH_3 è un precursore a sorgente singola per Al metallico tramite ossidazione dell'idruro in H_2 , catalizzato da $\text{Ti}^{3+}(\text{OiPr})_3$, che fornisce gli elettroni necessari per produrre cluster metallici di alluminio. Questi cluster sono instabili a livello colloidale e si uniscono e crescono fino a raggiungere dimensioni sufficientemente grandi da diventare stabili. Ciò dimostra essenzialmente un metodo per regolare le dimensioni dei nanocristalli metallici di alluminio, in un range di 100 nm, cambiando il solvente di reazione [7].

In secondo luogo, decomponendo AlH_3 con il reagente di Tebbe in tetraidrofurano, è stato ottenuto un semplice processo di sintesi colloidale di nanocubi di alluminio, con terminazione {100} monocristallina. **La dimensione e la forma dei nanocubi di alluminio sono controllate dal tempo di reazione e dal rapporto tra AlH_3 e reagente di Tebbe**, che, insieme alla temperatura di reazione, stabiliscono il controllo cinetico sulla crescita di nanocubi di alluminio. I nanocubi di alluminio producono forti amplificazioni del campo elettromagnetico molto localizzate in prossimità dei loro spigoli particolarmente acuminati e risonanze altamente suscettibili all'accoppiamento con substrati metallici. La superficie di ossido che si crea naturalmente li rende estremamente stabili all'aria. I nanocubi di alluminio

sintetizzati chimicamente forniscono un'alternativa sostenibile ai nanocubi di metalli nobili per applicazioni plasmoniche e nanofotoniche [8].

Durante il mio postdoc nel **gruppo del Prof. Oliviero Andreussi presso la University of North Texas, Denton, Texas, USA**, ho sfruttato schemi continui di “embedding” avanzati per simulazioni multiscala di sistemi della materia condensata a principi primi, come implementato nel codice Environ appartenente alla suite di codici QE, per modellare processi catalitici ed elettrochimici su interfacce solvate. In particolare, mi sono concentrato, da un lato, sugli **effetti di solvatazione nella reazione di evoluzione dell'ossigeno (OER) su un materiale catalitico promettente, come il TiO₂**, recentemente oggetto di ricerche approfondite. Dall'altro, ho contribuito allo studio, alla simulazione e allo **screening della attività catalitica, delle prestazioni e delle proprietà di un database di materiali bidimensionali (2D) candidati per OER e reazioni di riduzione dell'ossigeno (ORR)** mediante “high-throughput workflows” sistematici codificati appositamente, sfruttando approcci termodinamici computazionali accurati, basati su simulazioni atomistiche a principi primi [12].

Come postdoc "Senior" nel **gruppo del Dott. Arrigo Calzolari presso l'Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3, sede di Modena**, mi sono concentrato, da un lato, sullo **sviluppo, il test e l'applicazione di** approcci scientifici computazionali e **simulazioni a principi primi attraverso “high-throughput workflows”** (basati ad esempio su AiiDA), per lo studio di sistemi complessi (ad esempio **difettivi**, disordinati, policristallini, **amorfi**, ecc.) al fine di comprendere i meccanismi operativi fondamentali e modellare con successo dispositivi per l'elettronica di nuova generazione (elettronica sinaptica, computazione neuromorfica, ecc.), l'optoelettronica e oltre, nell'ambito del progetto europeo INTERSECT (PI: Dr. Calzolari) prima, e il progetto europeo OPEN MODEL poi. Dall'altro lato, nel continuare la mia attività nella nanoplasmonica quantistica, ho utilizzato approcci atomistici (TD)DFT insieme a simulazioni multi-fisiche, in particolare utilizzando implementazioni avanzate dell'elettromagnetismo, e multi-scala, basate su metodi agli elementi finiti e descrizioni continue (ad esempio, COMSOL Multiphysics) per modellare le proprietà di assorbimento e scattering di nanostrutture metalliche e dielettriche di interesse per la ricerca fondamentale e specifiche applicazioni.

In collaborazione con il gruppo di José Vidal-Gancedo presso l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona, ICMAB-CSIC, Spagna, abbiamo studiato l'ancoraggio di radicali organici attivi sulla superficie di nanoparticelle d'oro (AuNPs) nel contesto di dispositivi spintronici molecolari [13]. In particolare, presentiamo la prima dimostrazione di uno **“switch” molecolare di superficie basato su AuNPs decorate con radicali persistenti perclorotrifenilmetile (PTM)**. Le proprietà redox dei PTM vengono sfruttate per fabbricare “switch” elettrochimici con risposte ottiche e magnetiche, che mostrano un'elevata stabilità e reversibilità. L'interazione elettronica tra i radicali e la superficie d'oro viene studiata mediante assorbimento ottico UV-vis, mostrando una banda di assorbimento molto ampia nella regione del vicino infrarosso (NIR), che diventa più intensa quando i PTM vengono ridotti alla fase anionica. Utilizzando molteplici tecniche sperimentali, dimostriamo che questa interazione è probabilmente favorita dall'orientamento preferenzialmente piatto dei ligandi PTM sulla superficie metallica delle nanoparticelle, come confermato dalle simulazioni a principi primi.

ELENCO PUBBLICAZIONI

- [14] L. A. McCarthy, O. Verma, G. N. Naidu, L. Bursi, A. Alabastri, P. Nordlander, S. Link. Chiral plasmonic pinwheels exhibit orientation-independent linear differential scattering under asymmetric illumination. *Chem. Biomed. Imaging*, **1** (1), 30–39 (2023). <https://doi.org/10.1021/cbmi.2c00005>.

- [13] V. Lloveras, P. Elías-Rodríguez, L. Bursi, E. Shirdel, A. R. Goñi, A. Calzolari, J. Vidal-Gancedo. Multifunctional Switch Based on Spin-Labeled Gold Nanoparticles. *Nano Lett.*, **22** (2), 768–774 (2022). <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.1c04294>.
- [12] N. Karmodak, L. Bursi, O. Andreussi. Oxygen evolution and reduction on two-dimensional transition metal dichalcogenides. *J. Phys. Chem. Lett.*, **13** (1), 58–65 (2022). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c03431>.
- [11] S. S. E. Collins, E. K. Searles, L. J. Tauzin, M. Lou, L. Bursi, Y. Liu, J. Song, C. Flatebo, R. Baiyasi, Y.-Y. Cai, B. Foerster, T. Lian, P. Nordlander, S. Link, C. F. Landes. Plasmon energy transfer in hybrid nanoantennas. *ACS Nano*, **15** (6), 9522–9530 (2021). <https://doi.org/10.1021/acsnano.0c08982>.
- [10] K. D. Chapkin, L. Bursi, B. D. Clark, G. Wu, A. Lauchner, A.-L. Tsai, P. Nordlander, N. J. Halas. Effects of electronic structure on molecular plasmon dynamics. *J. Phys. Chem. C*, **124** (37), 20450–20457 (2020). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c06072>.
- [9] L. A. McCarthy, K. W. Smith, X. Lana, S. A. Hosseini Jebeli, L. Bursi, A. Alabastri, W.-S. Chang, P. Nordlander, S. Link. Polarized evanescent waves reveal trochoidal dichroism. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **117** (28), 16143–16148 (2020). <https://doi.org/10.1073/pnas.2004169117>.
- [8] B. D. Clark, C. R. Jacobson, M. Lou, D. Renard, G. Wu, L. Bursi, A. S. Ali, D. F. Swearer, A.-L. Tsai, P. Nordlander, N. J. Halas. Aluminum nanocubes have sharp corners. *ACS Nano*, **13** (8), 9682–9691 (2019). <https://doi.org/10.1021/acsnano.9b05277>.
- [7] B. D. Clark, C. J. DeSantis, G. Wu, D. Renard, M. J. McClain, L. Bursi, A.-L. Tsai, P. Nordlander, N. J. Halas. Ligand-dependent colloidal stability controls the growth of aluminum nanocrystals. *J. Am. Chem. Soc.*, **141** (4), 1716–1724 (2019). <https://doi.org/10.1021/jacs.8b12255>. [JACS Spotlights: *J. Am. Chem. Soc.*, **141**, 1393–1393 (2019)].
- [6] K. W. Smith, L. A. McCarthy, A. Alabastri, L. Bursi, W.-S. Chang, P. Nordlander, S. Link. Exploiting evanescent field polarization for giant chiroptical modulation from achiral gold half-rings. *ACS Nano*, **12** (11), 11657–11663 (2018). <https://doi.org/10.1021/acsnano.8b07060>.
- [5] K. D. Chapkin, L. Bursi, G. J. Stec, A. Lauchner, N. J. Hogan, Y. Cui, P. Nordlander, N. J. Halas. Lifetime dynamics of plasmons in the few-atom limit. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **115** (37), 9134–9139 (2018). <https://doi.org/10.1073/pnas.1805357115>.
- [4] R. Zhang, L. Bursi, J. D. Cox, Y. Cui, C. M. Krauter, A. Alabastri, A. Manjavacas, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari, E. A. Carter, F. J. García de Abajo, H. Zhang, P. Nordlander. How to identify plasmons from the optical response of nanostructures. *ACS Nano*, **11** (7), 7321–7335 (2017). <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b03421>.
- [3] L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. Quantifying the plasmonic character of optical excitations in nanostructures. *ACS Photonics*, **3** (4), 520–525 (2016). <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.5b00688>.
- [2] F. J. García de Abajo, R. Sapienza, M. Noginov, F. Benz, J. Baumberg, S. Maier, D. Graham, J. Aizpurua, T. Ebbesen, A. Pinchuk, J. Khurgin, K. Matczyszyn, J. T. Hugall, N. van Hulst, P. Dawson, C. Roberts, M. Nielsen, L. Bursi, M. Flatté, J. Yi, O. Hess, N. Engheta, M. Brongersma, V. Podolskiy, V. Shalaev, E. Narimanov, A. Zayats. Plasmonic and new plasmonic materials: general discussion. *Faraday Discuss.*, **178**, 123–149 (2015). <https://doi.org/10.1039/C5FD90022K>.

- [1] L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. Light-induced field enhancement in nanoscale systems from first-principles: the case of polyacenes. *ACS Photonics*, **1** (10), 1049–1058 (2014). <https://doi.org/10.1021/ph500269q>.

CONTRIBUTI SELEZIONATI IN CONFERENZE INTERNAZIONALI

- Settembre 2023 L. Bursi, A. Catellani, A. Calzolari. *First principles characterization of defect states in emerging materials for next-generation technology*. **Joint CMD 30 – FisMat 2023 conference** (Politecnico di Milano e Università Statale, Milano, Italia). Presentazione orale.
- Marzo 2021 L. Bursi, R. Chouhan, A. Catellani, A. Calzolari. *Formation and Diffusion of Charged and Neutral Defect States in Crystalline GeSe for Synaptic Electronics*. **2021 APS March Meeting** (Virtuale). Presentazione orale.
- Novembre 2020 L. Bursi, R. Zhang, K. D. Chapkin, N. J. Halas, P. Nordlander. *Universal metric for “plasmonicity” of excitations at the nanoscale*. **2020 Virtual MRS Spring/Fall Meeting & Exhibit** (Virtuale). Presentazione orale.
- Luglio 2018 L. Bursi, R. Zhang, K. D. Chapkin, A. Alabastri, N. J. Halas, P. Nordlander. *Universal metric for “plasmonicity” of excitations at the nanoscale*. **Plasmonics and Nanophotonics Gordon Research Conference** (Grand Summit Hotel at Sunday River, Newry, ME, USA). Presentazione di un poster.
- Agosto 2016 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Quantifying the plasmonic character of optical excitations in nanostructures*. **Quantum Plasmonics (QUPLA) Workshop** (Imperial College London, Royal School of Mines, South Kensington, London, UK). Presentazione di un poster.

INSEGNAMENTO

- 2017 – in corso Co-supervisione di studenti e dottorandi presso Università di Modena e Reggio Emilia (UniMoRe), Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3, Rice University, e University of North Texas.
- 2023 Incarichi di insegnamento (a studenti universitari):
- Corso “Laboratory of Quantum Simulation of Materials” (6 ore), nel corso di laurea magistrale in Physics–Fisica a UniMoRe (a.a. 2022–23, 2023–24);
- Corso “Fisica II” (6 credits, 54 ore, titolare del corso), nel corso di laurea in Ingegneria gestionale a UniMoRe (a.a. 2023–2024).
- 2019 Assistente alla didattica (a dottorandi) per il Corso di Modellazione Multi-fisica (ESEL 677 002, 26231), ECE Department, Rice University, tenuto dal Prof. Alessandro Alabastri (3 CFU, 20 ore).
- 2016 Assistente alla didattica per il Corso di Meccanica Quantistica, Università di Modena e Reggio Emilia, finanziato dal Ministero (35 ore).
- 2014 – 2015 Assistente alla didattica (a studenti universitari) per il Corso di Meccanica Quantistica, Università di Modena e Reggio Emilia, (70 ore).

“OUTREACH”

- Contributo a un’intervista sull’attività di ricerca all’Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3, “Facce da CnrNANO”, trasmesso per la Notte dei ricercatori, nel 2020. Partecipazione alla Notte dei ricercatori 2023.

- Contributo alla realizzazione di un corto sulla figura del ricercatore, presentato al film festival di Nonantola “4 Giorni Corti+2”, edizione 2020.
- Partecipazione a diverse attività di orientamento per studenti delle scuole superiori nel corso degli anni, tra cui “Una settimana da scienziato”, “Into the future”, “Piano lauree scientifiche”, e altre.
- Tutoraggio di studenti delle scuole superiori e universitari.

COMPETENZE INFORMATICHE

Programmi: Fortran, Python, Matlab, Pascal, C, C++, shell, parallel MPI and OpenMP paradigms (livello base), tecniche di algebra lineare, fitting di dati.

Programmi scientifici: Quantum ESPRESSO, GAMESS, GAUSSIAN, Yambo and OCTOPUS (simulazioni *ab initio*); AiiDA (infrastruttura automatizzata e interattiva e database per simulazioni); COMSOL Multiphysics (simulazioni multi-scala, basate su modelli continui, e di elettrodinamica classica); Mathematica, Matlab (calcolo numerico); gnuplot, grace, Avogadro, VMD (visualizzazione e analisi numerica); eccetera.

ALTRI MERITI

Referee per: Nature Physics, Nature Communications, ACS Nano, Physical Review X, Nanoscale, Chemical Communications, Applied Clay Science, ACS Applied Nano Materials, Scientific Reports, Physical Review B, Chemical Physics Letters, Molecules, Catalysts, Materials, Sensors, Coatings, Journal of Physics and Chemistry of Solids, The Journal of Physical Chemistry, Applied Sciences, Applied Physics A: Materials Science and Processing. Lista verificata da **Publons:** <https://publons.com/a/1582985>; merito: > **90° percentile**.

Ho dato prova di avere buone capacità di relazione con altre persone; esperienza nel lavoro di squadra e collaborazione; esperienza in attività didattiche con studenti delle scuole superiori e universitari.

MEMBERSHIPS

Material Research Society (2020-2021); American Physical Society (2019-2022). Società Italiana di Chimica (2018-2019); Royal Society of Chemistry (2015-2016).

REFERENZE

- Alice Ruini, Università di Modena e Reggio Emilia, Modena alice.ruini@unimore.it
- Arrigo Calzolari, Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3, Modena arrigo.calzolari@nano.cnr.it
- Stefano Corni, Università di Padova, Padova stefano.corni@unipd.it
- Peter Nordlander, Rice University, Houston, TX, USA nordland@rice.edu
- Oliviero Andreussi, University of North Texas, Denton, TX, USA oliviero.andreussi@unt.edu
- Naomi J. Halas, Rice University, Houston, TX, USA halas@rice.edu
- Elisa Molinari, Università di Modena e Reggio Emilia elisa.molinari@unimore.it

Luca Bursi

Informazioni Aggiuntive

PROGETTI ISCRA PER ACCESSO A RISORSE DI SUPERCALCOLO APPROVATI

7. (Novembre 2022 – in corso) PI del progetto Iscra C “*First principles characterization of defect states in materials, through AiiDA & QE, for next-generation technology*” (acronimo: AiiDAQE) mediante l’utilizzo dei sistemi HPC MARCONI 100 (processori IBM Power9 AC922, accelerati con NVIDIA Volta V100 GPUs) e GALILEO 100 (processori Intel CascadeLake), CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna.
6. (Novembre 2021 – Agosto 2022) PI del progetto Iscra C “*First principles characterization of defect states in materials, through AiiDA, QE, and NEB, for next-generation technology*” (acronimo: AiiDAdef) mediante l’utilizzo dei sistemi HPC MARCONI 100 (processori IBM Power9 AC922, accelerati con NVIDIA Volta V100 GPUs) e GALILEO 100 (processori Intel CascadeLake), CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna.
5. (Luglio 2017 – Aprile 2018) Co-PI del progetto Iscra C “*Studying the 2D and 1D size-dependence of the GPI by scaling the size of PAHs and Na atomic nanowires, in particular their length and aspect ratio, through TurboTDDFT and PlasmInd-GPI, toward comparison with independent jellium model, RPA and Classical Electrodynamics calculations*” (acronimo: GPI-Q1D) mediante l’utilizzo dei sistemi HPC MARCONI Lenovo NeXtScale (processori Broadwell) e MARCONI Lenovo Adam Pass (processori Knights Landing), CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna.
4. (Agosto 2016 – Maggio 2017) PI del progetto Iscra C “*Studying the 3D, 2D and 1D size-dependence of the Plasmonicity Index by scaling the size of metal nanoclusters, through TurboTDDFT and PlasmInd, toward comparison with independent jellium model analysis*” (acronimo: ScalPInd) mediante l’utilizzo dei sistemi HPC GALILEO IBM NeXtScale e MARCONI Lenovo NeXtScale, CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna.
3. (Ottobre 2015 – Luglio 2016) PI del progetto Iscra C “*Characterizing plasmonic properties of graphene nanoflakes through TurboTDDFT and PlasmInd for nanoplasmonic applications*” (acronimo: PInd-GNF) mediante l’utilizzo dei sistemi HPC FERMI Blue Gene/Q e GALILEO IBM NeXtScale, CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna.
2. (Ottobre 2014 – Luglio 2015) PI del progetto Iscra C “*Testing a Plasmonic Index through TurboTDDFT for nanoplasmonics applications*” (acronimo: PlasmInd) mediante l’utilizzo del sistema HPC FERMI Blue Gene/Q, CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna.
1. (Febbraio 2013 – Dicembre 2013) PI del progetto Iscra C “*Evaluating performances and scaling of TurboTDDFT for nanoplasmonics applications*” (acronimo: TDPlasm) mediante l’utilizzo del sistema HPC FERMI Blue Gene/Q, CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna.

SEMINARI

- 9/06/2022 L. Bursi. *First principles characterization of defect states in emerging materials for next-generation technology*.
Colloquio del CNR-Nano, Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3 & Università di Modena e Reggio Emilia, Modena.
- 26/06/2017 L. Bursi. *Towards quantitative quantum nanoplasmonics: Strategies to measure the “plasmonicity” of optical excitations in nanostructures*.
Smalley-Curl Institute, Rice University, Houston, TX 77005, USA.
- 1/02/2017 L. Bursi. *Strategies for the quantification of the plasmonic character of optical excitations in nanostructures*.
Colloquio del CNR-Nano, Istituto Nanoscienze, CNR-NANO-S3 & Università di Modena e Reggio Emilia, Modena.

LISTA CONTRIBUTI SCIENTIFICI IN CONFERENZE INTERNAZIONALI

- Settembre 2023 L. Bursi, A. Catellani, A. Calzolari. *First principles characterization of defect states in emerging materials for next-generation technology*. **Joint CMD 30 – FisMat 2023 conference** (Politecnico di Milano e Università Statale, Milano). Presentazione orale.
- Maggio 2023 L. Bursi, A. Catellani, A. Calzolari. *Ab initio defects & materials for next-generation technology*. **Yambo School - Ab initio many-body perturbation theory: from equilibrium to time-resolved spectroscopies and nonlinear optics** (Roma, Italia). Presentazione di un poster.
- Gennaio 2023 L. Bursi, A. Catellani, A. Calzolari. *Ab initio characterization of defect states in emerging materials for next-generation technology*. **21st International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods** (International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italia). Presentazione di un poster.
- Novembre 2021 L. Bursi, R. K. Chouhan, A. Catellani, A. Calzolari. *Ab initio characterization of defect states in materials for next-generation technology*. **International Workshop on Advanced Materials-to-Device Solutions for Synaptic Electronics** (Barcelona, Spagna). Presentazione di un poster.
- Marzo 2021 L. Bursi, R. Chouhan, A. Catellani, A. Calzolari. *Formation and Diffusion of Charged and Neutral Defect States in Crystalline GeSe for Synaptic Electronics*. **2021 APS March Meeting** (Virtuale). Presentazione orale.
- Marzo 2021 L. Bursi, R. Zhang, K. D. Chapkin, N. J. Halas, P. Nordlander. *Universal metric for “plasmonicity” of excitations at the nanoscale*. **2021 APS March Meeting** (Virtuale). Presentazione di un poster.
- Marzo 2021 L. Bursi, L. A. McCarthy, K. W. Smith, A. Alabastri, W.-S. Chang, P. Nordlander, S. Link. *Evanescent field polarization for giant chiroptical modulation from achiral gold half-rings: Theoretical insight from simulations*. **2021 APS March Meeting** (Virtuale). Presentazione di un poster.
- Novembre 2020 L. Bursi, R. Zhang, K. D. Chapkin, N. J. Halas, P. Nordlander. *Universal metric for “plasmonicity” of excitations at the nanoscale*. **2020 Virtual MRS Spring/Fall Meeting & Exhibit** (Virtuale). Presentazione orale.
- Novembre 2020 L. Bursi, L. A. McCarthy, K. W. Smith, A. Alabastri, W.-S. Chang, P. Nordlander, S. Link. *Evanescent field polarization for giant chiroptical modulation from achiral gold half-rings: Theoretical insight from simulations*. **2020 Virtual MRS Spring/Fall Meeting & Exhibit** (Virtuale). Presentazione orale.
- Luglio 2019 L. Bursi, R. Zhang, K. D. Chapkin, N. J. Halas, P. Nordlander. *Universal metric for “plasmonicity” of excitations at the nanoscale*. **ESCOMP 2019: Advanced Electronic Structure Methods in Condensed Matter Physics** (EPFL, Lausanne, Svizzera). Presentazione di un poster.
- Agosto 2018 L. Bursi, R. Zhang, K. D. Chapkin, N. J. Halas, P. Nordlander. *Universal metric for “plasmonicity” of excitations at the nanoscale*. **Smalley-Curl Institute 4th Annual Summer Research Colloquium** (Smalley-Curl Institute, Rice University, Houston, TX 77005, USA). Presentazione orale.
- Luglio 2018 L. Bursi, R. Zhang, K. D. Chapkin, A. Alabastri, N. J. Halas, P. Nordlander. *Universal metric for “plasmonicity” of excitations at the nanoscale*. **Plasmonics and Nanophotonics Gordon Research Conference** (Grand

- Summit Hotel at Sunday River, Newry, ME, USA). Presentazione di un poster.
- Agosto 2017 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari, P. Nordlander. *Towards quantitative Quantum Nanoplasmonics*. **Smalley-Curl Institute 3rd Annual Summer Research Colloquium** (Smalley-Curl Institute, Rice University, Houston, TX 77005, USA). Presentazione orale.
- Agosto 2016 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Quantifying the plasmonic character of optical excitations in nanostructures*. **Quantum Plasmonics (QUPLA) Workshop** (Imperial College London, Royal School of Mines, South Kensington, London, UK). Presentazione di un poster.
- Giugno 2016 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Towards a quantitative description of the plasmonic character of optical excitations in nanostructures*. **META 2016, the 7th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics** (Torremolinos, Malaga, Spain). Presentazione orale.
- Giugno 2016 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **SINFO - Surface, Interface and Functionalization Processes in Organic Compounds and Applications - 3rd Workshop** (Università Federico II di Napoli). Presentazione di un poster.
- Aprile 2016 Participation in the **Nanostructured Metal Optics: from Theory to Enhanced Spectroscopies, Sensing, Imaging Workshop** (Scuola Normale Superiore di Pisa).
- Luglio 2015 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Quantifying the plasmonic character of optical excitations in nanostructures from first principles*. **Plasmonica 2015 Workshop** (Università di Padova). Presentazione orale.
- Marzo 2015 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **DPG Spring Meeting** (Technische Universitaet, Berlin, Germania). Presentazione orale.
- Febbraio 2015 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **Nanomaterials for Applications in Energy Technology Gordon Research Conference** (Ventura Beach Marriott, Ventura, CA, USA). Presentazione di un poster.
- Febbraio 2015 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **Nanomaterials for Applications in Energy Technology Gordon Research Seminar** (Ventura Beach Marriott, Ventura, CA, USA). Presentazione di un poster.
- Febbraio 2015 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **Nanomaterials for Applications in Energy Technology Gordon Research Seminar** (Ventura Beach Marriott, Ventura, CA, USA). Presentazione orale.
- Febbraio 2015 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **Faraday Discussion 178: Nanoplasmonics** (Royal Society of Chemistry at Burlington House and Geological Society, London, UK). Presentazione di un poster.
- Gennaio 2015 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods**

- (International Centre for Theoretical Physics, Trieste). Presentazione di un poster.
- Luglio 2014 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **Plasmonica 2014 Workshop** (Università di Roma La Sapienza). Presentazione di un poster.
- Giugno 2014 L. Bursi, A. Calzolari, S. Corni, E. Molinari. *Light-induced field enhancement in polyacenes*. **SINFO - Surface, Interface and Functionalization Processes in Organic Compounds and Applications - 2nd Workshop** (Università di Trieste). Presentazione orale.
- Novembre 2013 Conferenza **“Frontiers of Condensed Matter Physics”** (International Centre for Theoretical Physics, Trieste).

PARTECIPAZIONE A SCUOLE

- Giugno 2014 “ICOE 2014 School on Predictive Modelling and Computational Methods for Organic Electronics” (Università di Modena e Reggio Emilia).
- Marzo 2013 “Introduction to the FERMI Blue Gene/Q for users and developers” (CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna).
- Agosto 2012 “HoW exciting! Hands-on Workshop on Excitations in Solids 2012” (Humboldt Universitaet zu Berlin, Germania).
- Giugno 2010 “Summer School” su calcolo parallelo (CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna).
- Giugno 2010 “Introduction to the Blue Gene/P for users and developers” (CINECA, Centro di supercalcolo, Bologna).