

Elisa Molinari - Curriculum Vitae

Università di Modena e Reggio Emilia
Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche – FIM
Via Campi 213A, 41125 Modena
Telefono: 059 2055 -205 (segreteria -629)
E-mail: molinari@unimore.it



Posizioni accademiche in breve

dal 2001 professoressa ordinaria di Fisica della Materia, Università di Modena e Reggio Emilia
dal 1992 al 2001 professoressa associata di Fisica della Materia, Università di Modena e Reggio Emilia
dal 1985 al 1992 ricercatrice CNR all'Istituto 'O.M. Corbino', Roma
dal 1983 al 1985 Max-Planck Gesellschaft, ricercatrice presso l'Istituto FKF di Stoccarda (Germania)
dal 1983 al 1985 Max-Planck Gesellschaft, ricercatrice presso il Laboratorio Alti Campi Magnetici di Grenoble (Francia)

Formazione

1981 Laurea con lode in Fisica all'Università di Modena
1976 Diploma di maturità classica, Liceo 'L.A. Muratori', Modena

Ricerca

- **Profilo**

La mia ricerca riguarda le nanoscienze e la comprensione dei fenomeni fisici fondamentali che caratterizzano la materia; la progettazione dei materiali e dei nano-(bio-)dispositivi del futuro; lo sviluppo di metodi computazionali basati sulla fisica quantistica anche per applicazioni in chimica e biologia.

Il percorso scientifico che ho compiuto ha quindi un carattere fortemente interdisciplinare: è iniziato nel campo della fisica teorica, e si colloca ora all'interfaccia tra le scienze fisiche e chimiche della materia, la biofisica, le scienze computazionali –grandi codici e dati–, e le applicazioni, specie nelle tecnologie dell'informazione e dell'energia e ambiente. Sono da sempre interessata anche a un'interazione ravvicinata con la ricerca sperimentale, ed ho collaborato in più occasioni alla progettazione e comprensione di nuovi esperimenti e osservazioni.

Sono *Fellow* della American Physical Society, eletta nel 1999 “for her contribution to the theory of semiconductors and their interfaces, in particular, her fundamental work on electron-electron and electron-phonon interaction in nanostructures; and for her involvement in the training of young theorists from many countries.”

- **Principali temi di ricerca** (in ordine cronologico inverso, a partire dai più recenti):
 - *Fenomeni coerenti in nano(bio)sistemi organici naturali e artificiali.* I processi che portano alla separazione di carica nelle prime fasi (sub-100 ps) dopo la foto-eccitazione di sistemi molecolari non sono ancora pienamente chiariti. Abbiamo proposto e studiato alcuni sistemi modello, rappresentativi di proprietà di aggregati fotosintetici e potenzialmente rilevanti anche in materiali organici artificiali di interesse per il fotovoltaico. Le nostre simulazioni hanno previsto un ruolo importante della coerenza e degli accoppiamenti vibronici. I risultati ci hanno portato a progettare esperimenti con spettroscopie ultraveloci che hanno confermato il ruolo e la generalità dei fenomeni coerenti anche in materiali complessi, e la prospettiva di modularli nelle primissime fasi dei processi fotovoltaici. [1-4]
 - *Nuove fasi correlate nella materia.* Oltre cinquant'anni fa Walter Kohn e altri autorevoli fisici hanno ipotizzato l'esistenza di una nuova fase della materia, detta isolante eccitonico, costituita da coppie elettrone-lacuna stabili nello stato fondamentale. Il nostro gruppo ha recentemente predetto alcuni sistemi come nuovi candidati ideali per realizzarla a causa dell'intensità delle interazioni a lungo raggio. A partire da una descrizione da principi primi degli eccitoni, dello schermo elettronico e dall'analisi delle proprietà topologiche, abbiamo aperto un campo di ricerca che è ora oggetto di intensa attività teorica e sperimentale anche in molti altri laboratori internazionali. [5-7]
 - *Materiali quantistici: spettroscopie e applicazioni.* I sistemi a bassa dimensionalità, specialmente quelli basati sul carbonio e sul grafene o altri strati quasi-bidimensionali, sono tra i protagonisti delle nanoscienze e delle nanotecnologie degli ultimi anni sia per la loro rilevanza tecnologica, sia come laboratori per studiare le correlazioni elettroniche nella materia. Il nostro gruppo di ricerca è stato tra i primi a riconoscere quanto crucialmente le impronte spettrali e le applicazioni di questi sistemi dipendano dalla spettroscopia e dalle specifiche interazioni elettrone-elettrone che essa instaura nel sistema. Con la 'computational spectroscopy' abbiamo, tra l'altro, contribuito a capire come controllare i processi di formazione di nanostrutture grafeniche sulle superfici, a quantificare la loro natura nanoplasmonica e a progettare applicazioni ottiche e optoelettroniche. Vale la pena di ricordare alcuni primi lavori sulle correlazioni elettroniche nell'ottica e nel trasporto di punti quantici, in cui progettavamo implementazioni tutto-ottiche della computazione quantistica basate su quantum dot a semiconduttore: un argomento visionario che oggi è nuovamente al centro della ricerca internazionale. [8-13]
 - *Sistemi biomolecolari e nanodispositivi bio-ispirati.* Alcuni fenomeni importanti in sistemi biomolecolari, come i processi di trasferimento elettronico, non sono ben descritti dalla dinamica molecolare convenzionale. Usiamo i metodi della fisica computazionale da primi principi per capire le proprietà elettroniche di alcune biomolecole rilevanti (G4-DNA, metalloproteine) e proporre nanodispositivi bio-ispirati che utilizzano questi fenomeni e sistemi. Siamo stati tra i primi a utilizzare gli stessi metodi per studiare l'interazione di piccole biomolecole e proteine con le superfici solide, che gioca un ruolo chiave nella maggior parte dei nanobiodispositivi elettronici o fotonici. Concettualmente interessante il primo nanobiotransistor, realizzato in collaborazione con gruppi sperimentali di biologi, chimici, fisici e ingegneri, che utilizza la funzione fisiologica di trasferimento elettronico di una proteina, l'azzurina, coinvolta nella respirazione di un batterio. [14-18]
 - *Vibrazioni e interazioni elettrone-fonone nelle strutture a semiconduttore.* Nelle nanostrutture e alle interfacce tra semiconduttori i fononi e le loro interazioni si modificano rispetto ai materiali estesi, con effetti dirompenti su molte proprietà tecnologicamente importanti. Alla comparsa delle prime eterostrutture a semiconduttore, siamo stati tra i primi –e tra i più citati– a predire le caratteristiche fondamentali degli spettri vibrazionali di superreticoli e l'impatto sulla interazione elettrone-fonone alle interfacce, nonché il loro ruolo nel controllare il trasporto e il rilassamento elettronico nelle nanostrutture e le implicazioni nano- e opto-elettroniche. [19-20]

- **Pubblicazioni**

L'elenco completo e aggiornato delle pubblicazioni è reperibile su:
<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7102949582>
oppure <https://orcid.org/0000-0002-0692-6096>.

Nell'insieme ho pubblicato oltre 250 lavori su riviste internazionali con peer review, che hanno ricevuto oltre 10000 citazioni (*h-index* 53, dati da ISI WoS, marzo 2021).

Nel seguito alcune pubblicazioni selezionate, riferite ai temi di ricerca sopracitati (citazioni da ISI WoS, marzo 2021):

Fenomeni coerenti in nano(bio)sistemi organici naturali e artificiali:

1. De Sio et al, Intermolecular conical intersections in molecular aggregates, *Nature Nanotechnology* 16, 63 (2021).
2. S.M. Falke et al, Coherent ultrafast charge transfer in an organic photovoltaic blend, *Science* 344, 1001 (2014) [325 citazioni]
3. De Sio et al, Tracking the coherent generation of polaron pairs in conjugated polymers, *Nature Communications* 7, 13742 (2016). [83 citazioni]
4. C. Rozzi et al, Quantum coherence controls the charge separation in a prototypical artificial light-harvesting system, *Nature Communications* 4, 1602 (2013). [181 citazioni]

Nuove fasi correlate nella materia:

5. S. Ataei et al, Evidence of ideal excitonic insulator in bulk MoS₂ under pressure, *Proc Natl Acad Sci USA*, pubblicato on line: <https://doi.org/10.1073/pnas.2010110118>, in corso di stampa (2021).
6. D. Varsano et al, A monolayer transition-metal dichalcogenide as a topological excitonic insulator, *Nature Nanotechnology* 15, 367 (2020).
7. D. Varsano et al, Carbon nanotubes as excitonic insulators, *Nature Communications* 8, 1461 (2017).

Materiali quantistici: spettroscopie e applicazioni:

8. J. Maultsch et al, Exciton binding energies in carbon nanotubes from two-photon photoluminescence, *Phys. Rev. B* 72, 241402 (2005) [642 citazioni].
9. D. Prezzi et al, Optical properties of graphene nanoribbons: The role of many-body effects, *Phys. Rev. B* 77, 041404 (2008) [208 citazioni].
10. P. Ruffieux et al, Electronic Structure of Atomically Precise Graphene Nanoribbons, *ACS Nano* 6, 6390 (2012) [297 citazioni].
11. Chang, E et al, Excitons in carbon nanotubes: An ab initio symmetry-based approach, *Phys. Rev. Lett.* 92, 196401 (2004) [259 citazioni].
12. A. Hartmann et al, Few-particle effects in semiconductor quantum dots: Observation of multicharged excitons *Phys. Rev. Lett.* 84, 5648 (2000) [237 citazioni].
13. F. Troiani et al, Exploiting exciton-exciton interactions in semiconductor quantum dots for quantum-information processing, *Phys. Rev. B* 62, R2263 (2000) [171 citazioni].

Sistemi biomolecolari e nanodispositivi bio-ispirati:

14. R. Di Felice et al, DFT study of cysteine adsorption on Au(111), *J. Phys. Chemistry B*, 107, 1151 (2003). [188 citazioni]
15. F. Iori et al, GoIP: the Interaction of Proteins With Au(111) Surfaces in Water. *J. Computational Chemistry* 30, 1465 (2009). [186 citazioni]
16. G. Maruccio et al, Towards Protein Field-Effect Transistors: Report and Model of a Prototype, *Advanced Materials* 17, 816 (2005). [72 citazioni]
17. R. Rinaldi et al, Solid-State Molecular Rectifier Based on Self-Organized Metalloproteins, *Advanced Materials* 14, 1453 (2002). [63 citazioni]
18. A Calzolari et al, G-quartet biomolecular nanowires, *Appl. Phys. Lett.* 80, 3331 (2002). [72 citazioni]

Vibrazioni e interazioni elettrone-fonone nelle strutture a semiconduttore

19. A. Debernardi et al, Anharmonic phonon lifetimes in semiconductors from density-functional perturbation-theory, *Phys. Rev. Lett.* 75, 1819 (1995). [250 citazioni]
20. H. Rucker et al, Microscopic calculation of the electron-phonon interaction in quantum-wells *Phys. Rev. B* 45, 6747 (1992). [233 citazioni]

• Congressi

- Invited/plenary speaker in oltre 200 congressi e workshop internazionali, tra cui i principali nelle scienze fisiche e chimiche della materia, e più recentemente anche sul calcolo scientifico ad alte prestazioni. Tra questi: International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS), March Meeting of the Condensed Matter Division of the American Physical Society (APS), March Meeting of the Condensed Matter Division of the German Physical Society, the Annual Meeting of the American Chemical Society (ACS), the Spring Meeting of the Materials Research Society (MRS), the European Conference on Surface Science (ECOSS), the International Conference on Modulated Semiconductor Structures (MSS), the Nanotube Conference (NT).
- Organizzo e (co-)presiedo workshop tematici di rilievo. Tra i più recenti e a titolo di esempio: Excitonic insulator: New perspectives in long-range interacting systems (Lausanne 2018); Materials Design at the Exascale: High-performance and High Throughput Computing (Trieste 2018); Synergy between quantum computing and high-performance computing (ETH Zurigo 2017); High performance computing for 2D materials research (Graphene Week Helsinki 2019). Sono stata presidente/componente di Comitati scientifici di molti congressi internazionali nel campo, fra i quali a titolo di esempio Chem2DMat (Bologna 2021), Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (Genova 2007), molte edizioni di ICPS e MSS. Ho presieduto diversi congressi nazionali in questi campi.

• Principali attività di direzione, consulenza scientifica, valutazione della ricerca

- Direzione del Centro di Eccellenza Europeo MaX – Materials design at the exascale (2015-oggi): si tratta di una e-infrastruttura europea, che ho fondato nel 2015 coinvolgendo diversi gruppi di ricerca italiani ed europei. L'obiettivo di MaX è assicurare che il software scientifico *open-source* sviluppato in Europa per lo studio dei materiali, attualmente considerato leader nel mondo, possa mantenere e ulteriormente estendere le sue capacità e il suo impatto anche in presenza di nuove tecnologie per il supercalcolo scientifico che si prevedono dirompenti. Solo così potremo mantenere e rafforzare l'eccellenza della nostra ricerca teorico-computazionale e contribuire allo sviluppo delle tecnologie digitali europee. MaX è finanziato dalla UE come e-infrastruttura (due successivi progetti triennali Horizon2020).
- Direzione dell'INFM - Istituto Nazionale per la Fisica della Materia del CNR (2007-2010), comprendente 21 strutture di ricerca confluite nel CNR dall'INFM: 2 Laboratori Nazionali (TASC a Trieste e MDM ad Agrate, nella sede di STMicroelectronics), 10 Centri di Ricerca (a Milano, Trieste, Trento, Modena, Pisa, Roma*2, Napoli, Lecce, Catania), 9 Laboratori regionali, oltre a una struttura di management e coordinamento basata a Genova; oltre 420 dipendenti e oltre 650 associati (~ 430 docenti o ricercatori universitari, ~ 220 dottorandi e post-doc).
- Direzione del Centro di Ricerca S3 dell'INFM a Modena (2002-2007): S3 (nanoStructures and bioSystems at Surfaces) è il Centro di Ricerca e Sviluppo dell'INFM che abbiamo fondato nel 2002, grazie a un progetto scientifico quinquennale da me coordinato in risposta a un bando competitivo valutato da un comitato internazionale indipendente. La scelta del focus scientifico –all'interfaccia tra le nano- e le bio-scienze sia in termini fisici che concettuali– ha anticipato quella che sarebbe diventata un'importante linea di sviluppo del campo. S3 è successivamente confluito nel CNR ed è oggi una delle due sedi dell'Istituto Nanoscienze, insieme con il Laboratorio NEST parallelamente istituito presso la Scuola Normale di Pisa. Conta oggi una trentina di ricercatori e tecnologi e altrettanti assegnisti di ricerca e studenti di dottorato.
- Council di ESRF – European Synchrotron Radiation Facility (2014-oggi)

- Fritz-Haber-Institute of the Max-Planck Gesellschaft, Berlino: Scientific Board (2015-oggi)
- Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg: Scientific Board (2016-oggi)
- JARA-CSD – Center for Simulation and Data Science, Jülich-Aachen Research Alliance: Advisory Board (2018-oggi)
- EuroHPC Joint Undertaking - Research and Innovation Advisory Board (2019-oggi)
- HPC3 – High Performance Computing Centres of Excellence Council: vice-presidente (2019-oggi).
- EU High Level Group on Materials (2018-oggi).
- Università di Trento - Consiglio di amministrazione (2012-18)
- Università di Modena e Reggio Emilia - Consiglio di Amministrazione (dal 2020); Senato Accademico (1994-99)
- Helmholtz Association: Program on Nano and Microsystems, and Karlsruhe Institute of Technology (KIT): External Advisory Board Member (2010-16).
- EU Advisory Group on Nanosciences, Nanotechnologies, Materials, New Production Materials (2002-07).
- OECD/OCSE, Working Party on Nanotechnology (2007-14).
- Program Committee NMP – Nano, Materials, Production Systems, UE 7° Programma Quadro: Member and Head of Italian Delegation (2007-2014).
- Program Committee NMBP - Nanotechnologies, Advanced materials, Biotechnology, Advanced manufacturing and processing, UE Horizon2020: Expert Member, Italian Delegation (2014-2020).
- Comitato di Indirizzo e Monitoraggio Scientifico e Industriale (CIMS) della Rete Alta Tecnologia della Regione Emilia Romagna (2011 – 2014).
- APS -American Physical Society, Executive Committee del Forum on International Physics (2017-19)
- IUPAP – International Union for Pure and Applied Physics: Scientific Secretary della Semiconductor Commission (1999-2003); Associate Secretary General (2002-2003); Componente del Working Group on Women in Physics (2002-03).
- European Research Council – ERC: Componente di Advanced Grants Evaluation Panels (2009-2011).
- Programma FIRB Futuro in Ricerca del MIUR, bando 2012: Chair del panel per la valutazione dei progetti nel settore ERC PE (tutti i sottosectori)
- Associazione Donne e Scienza, componente del Consiglio delle Responsabili della Associazione (2019-oggi); gruppo delle socie fondatrici (luglio 2006)
- Festival della Scienza di Genova, Comitato scientifico (2003-12)
- CINECA, Comitato scientifico (2010-15).
- Editorial Board, Scientific Reports (2014-2017).
- Editorial Board, Solid State Communications (1990-2008).

- **Progetti e collaborazioni di ricerca**

Nel seguito i principali progetti scientifici a cui ho partecipato come coordinatrice dell'intero progetto (**)
oppure di una delle unità di ricerca (*).

Principali progetti attivi

** MaX: Materials Design at the eXascale - European Centre of Excellence (EU-H2020, 2018-2021)
[finanziamento totale ~8 500 000 Euro, finanziamento della mia unità 1 580 000 Euro]

** EXC-INS: Excitonic insulator in two-dimensional long-range interacting systems (PRIN, 2018-2022) [totale ~940 000 Euro, unità ~405 000 Euro]

- * BIG-MAP: Novel methodologies for autonomous discovery of advanced battery chemistries (EU-H2020) [unità ~240.000 Euro]
- * IQBITS: Integrated Qubits Towards Future High-Temperature Silicon Quantum Computing Hardware Technologies (EU-H2020, Fet-Open, 2019-2022) [unità ~400.00 Euro]
- * MUSIQ: Multiphoton Microscopy and Ultrafast Spectroscopy: Imaging meets Quantum (EU-H2020, Msca-Itn, 2018-2022) [unità ~260 000 Euro]
- * SUPER: Supercomputing unified platform (POR-FESR Emilia Romagna, 2019-21) [unità ~357 000 Euro]

Alcuni progetti precedenti (selezione)

- ** MaX: Materials Design at the eXascale - EU Centre of Excellence (EU-H2020, e-INFRA, 2015-18)
- ** PROSURF Computational toolbox for protein-surface docking (FP6-EU STREP, 2006-09)
- * EXCITING First-principles approach to Optical Properties of Solids (FP6-EU TMR Network 2002-05)
- * SAMBA Single protein biomolecular transistor (FP6-EU project, IST-FET, 2001-04)
- * DNA-wires DNA-based nanowires (FP6-EU project, IST-FET, 2003-05)
- * NOMADE Nanomolecular devices (FIRB, 2002-06)
- ** Blow-up. Images from the nanoworld (<http://blowup.nano.cnr.it/>) (Fondazione CRMo 2006)
- ** Nanolab. 5 progetti per nuova strumentazione di ricerca presso il Centro S3 (Fondazione CRMo 2002-7)
- * SQID Semiconductor Implementation of Quantum Information Devices (FP6-EU, IST-FET 2000-02);
- * SSQI Mesoscopic Implementation of Quantum Information Processing Devices (INFM PRA 1999-2001)
- ** S3 nanoStructures and bioSystems at Surfaces – Centro di ricerca e Sviluppo (INFM CRS 2002-06)
- ** Marie Curie Research Training Grant UH (FP4-Marie Curie 1998-99)
- * OLIGO-LED Properties of modified oligothiophenes for organic LEDs (PRIN 1999-2001)
- * ULTRAFAST Ultrafast quantum optoelectronics (FP5-EU TMR Network 1997-2001)
- * NANOSCI-ERA Nanoscience in the European Research Area - EU ERAnet (FP6 2005-2010)
- * NANOPT NANometre Structures for Future OPToelectronic Applications (FP5-EU-ESPRIT 1992-9)
- ** NANOWIRES, con Weizmann Institute of Science, Israel: M. Heiblum (FIRB Internaz. 2007-10)
- ** It-Columbia University Partnership on carbon-based nanoscience: A. Pinczuk (MAE 2008-09)
- * DOTS Quantum phenomena in dots, con NRC Ottawa: P. Hawrylak (FIRB Internaz. 2007-10)
- ** QCCS Quantum Control of Charge & Spin: Next Generation Nanodevices – con Tokyo University: S. Tarucha (MAE 2003-04)
- ** OOM - Optics of Organic Materials - con Univ. S. Paulo, Brasile: M.J. Caldas (MAE 2002)
- ** WIP – Europe for the 1st Int. Conference on Women in Physics – UNESCO, Paris, 2002 (EU FP6 2001).

- **Attività didattica e di formazione**

Attualmente sono docente di 'Fundamentals of Nanoscience' presso il corso di Laurea Magistrale in 'Physics' e di 'Fisica Generale' presso il Corso di Laurea in 'Ingegneria del Veicolo' dell'Università di Modena e Reggio Emilia. Negli anni ho tenuto insegnamenti di fisica generale in altri corsi di studio di Ingegneria e Scienze della Vita.

Faccio parte del Collegio dei docenti della Scuola Dottorato in 'Physics and Nanoscience'. Ho diretto e tenuto corsi in numerose scuole nazionali e internazionali a livello di dottorato e post-dottorato.

Nel mio gruppo di ricerca si sono formati almeno una decina di PhDs e una ventina di giovani ricercatori e post-doc; la percentuale di ragazze è tipicamente molto superiore alla media nel campo. Almeno 8 di questi hanno costruito percorsi scientifici autonomi di successo e sono oggi professori ordinari (rientrati in Italia presso PoliTo, SISSA, UniBo, UniPd, oppure in Università all'estero; 3 di questi sono donne); molti altri sono docenti o ricercatori in enti di ricerca o nell'industria. Due giovani del mio gruppo sono risultati vincitori di progetti ERC; un altro è stato selezionato anche se non è rientrato tra i progetti finanziati.

Modena, marzo 2021