Curriculum reso sotto forma di dichiarazione sostitutiva di atto di notorietà, ai sensi degli artt. 46 e 47 del D.P.R. 445/2000 (si allega fotocopia documento di identità valido). Consapevole, secondo quanto prescritto dall'art. 76 del D.P.R. 445/2000, della responsabilità penale cui può andare incontro in caso di dichiarazione mendace, falsità negli atti ed uso di atti falsi, il sottoscritto dichiara sotto la propria responsabilità quanto segue:

# CURRICULUM GIOVANNI DI LIBERTO

## INFORMAZIONI PERSONALI

| | |
|---|---|
| Cognome, Nome: | Di Liberto Giovanni |
| Data di Nascita: | 13/04/1991 |
| Luogo di Nascita: | Bergamo (BG), Italia |
| Cittadinanza: | Italiana |
| Indirizzo e-mail: | giovanni.diliberto@unimib.it |


## STUDI E TITOLI ACCADEMICI

**Dottorato di Ricerca in Chimica**: 2015 – 2018, XXXI ciclo di dottorato. Università degli Studi di Milano, Tutor: Prof. Michele. Ceotto.
Dottorato finanziato dal progetto ERC “Semicomplex”.

**Laurea Magistrale in Scienze Chimiche**: 2013 - 2015, Università degli Studi di Milano, Relatore: Prof. Michele Ceotto.

Voto Finale: 110/110 Cum Laude.
Votazione esami:10 esami 30/30 Cum Laude, 1 esame 30/30, 1 esame 29/30.

Titolo della Tesi: Studio da principi primi di $TiO_2$ dopato per la fotocatalisi e metodi teorici per la dinamica semiclassica.

**Laurea in Chimica**: 2010 - 2013, Università degli Studi di Milano, Relatore: Prof. Michele Ceotto.

Voto Finale: 110/110 Cum Laude.
Votazione esami:16 esami 30/30 Cum Laude, 2 esami 30/30, 2 esami 29/30.

Titolo della Tesi: Importanza dell'approccio teorico-computazionale nello studio di materiali innovativi a base $TiO_2$.

**Diploma**: 2006 – 2010, Istituto Tecnico “Giulio Natta” Bergamo (BG), Italy.
Voto Finale: 100/100.

## ESPERIENZE LAVORATIVE

**Ricercatore a Tempo Determinato (RTDA)**: 2020 – Presente, Università degli Studi di Milano-Bicocca, gruppo del Prof. Gianfranco Pacchioni.

**Assegnista di Ricerca**: 2018 – 2020, Università degli Studi di Milano-Bicocca, gruppo del Prof. Gianfranco Pacchioni.

**Visiting scientist**: 15/09/2019 – 08/11/2019 – Universitat de Barcelona, gruppo del Prof. Francesc Illas.

### 3a PARTECIPAZIONE IN GRUPPI DI RICERCA E PRINCIPALI COLLABORAZIONI

2) A partire da Ottobre 2018 sono membro del gruppo del Prof. Pacchioni presso l'Università degli Studi di Milano Bicocca. Mi occupo dello studio e della simulazione di materiali compositi basati su semiconduttori applicati in fotocatalisi. Inoltre, lavoro anche allo sviluppo e applicazione di metodologie computazionali che consentano, rispetto agli approcci convenzionali, una migliore descrizione della struttura elettronica di semiconduttori.

1) Nel periodo 2014-2018 sono stato membro del gruppo del Professor Ceotto presso l'Università degli Studi di Milano prima come studente di tesi e successivamente come studente di dottorato. Il mio progetto di dottorato è stato finanziato da un grant ERC, che mi ha consentito di lavorare con ricercatori di fama internazionale.

## ATTIVITA' DIDATTICA

7) Docente del Laboratorio di Chimica Generale del Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Chimiche dell'Università degli Studi di Milano Bicocca.

6) Seminario (1h) tenuto presso l'Universitat de Barcelona focalizzato sulla modellizzazione di sistemi complessi costituiti da eterogiunzioni a base $TiO_2$ (2019).

5) Docente allenatore (8h) di selezionati studenti delle scuole superiori in preparazione ai Giochi delle Chimica, edizione 2018. Attività inserita all'interno del "Progetto Orientamento" (2018).

4) Tutor (18h) di Docenti di Scuole Secondarie di Secondo grado durante l'attività "Chimica su PC". Attività inserita all'interno del "Piano Lauree Scientifiche (PLS)" (2018).

3) Assistenza (4h) al Lab di Chimica Fisica A del corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, presso l'Università degli Studi di Milano, tenuto dal Prof. Ceotto (2018).

2) Docente allenatore (8h) di selezionati studenti delle scuole superiori in preparazione ai Giochi delle Chimica, edizione 2017. Attività inserita all'interno del "Progetto Orientamento" (2017).

1) Assistenza (4h) al Lab di Chimica Fisica A del corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Milano, tenuto dal Prof. Ceotto (2016).

**ATTIVITA' COME CORRELATORE DI TESI DI LAUREA**

**Correlatore** di tesi di due studenti del *corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Chimiche*, Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università degli Studi di Miano Bicocca.

**ATTIVITA' COME ASSISTENTE ALLA SUPERVISIONE DI STUDENTI DI DOTTORATO**

**Assistenza alla supervisione** di uno studente di Dottorato della *Scuola di Dottorato in Scienze Chimiche, Geologiche ed Ambientali*, Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università degli Studi di Milano Bicocca.

## PROGETTI SOTTOPOSTI A PEER REVIEW APPROVATI COME PRINCIPAL INVESTIGATOR

1) Progetto "ISCRA B" finanziato dal CINECA dal titolo "Modelling TiO2-Passivated Low Band Gap Semiconductors for Efficient Electron Injection and High Photoactivity (TT-LSEMI)". Il progetto ha la durata di un anno e consiste in 500000 CPU ore (2020).

2) Progetto "HPC17W04A2" finanziato da HPC Europa3 dal titolo "Modelling of realistic $TiO_2$-based heterojunctions by means of Density Functional Theory". Il progetto ha durata di due mesi e consiste in 60000 CPU ore da spendere presso il Barcelona Super Computing Center (BSC). Inoltre, il progetto include un finanziamento pari a 3142.00 Euro ed un soggiorno di due mesi presso l'Universitat de Barcelona (2019).

1) Progetto "ISCRA B" finanziato dal CINECA dal titolo "Modelling of a $TiO_2$ (001)-(101) based heterojunction with an efficient charge carriers separation and high photoactivity (THETEC)". Il progetto ha la durata di un anno e consiste in 2300000 CPU ore (2019).

## PREMI E RICONOSCIMENTI

6) **Vincitore del premio "Giuseppe del Re"** erogato dalla divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (2020).

5) **Primo classificato nell'ambito 3, Area di riferimento -03 Science Chimiche al Premio "Giovani Talenti"** istituito dall'Università degli Studi di Milano Bicocca con il patrocinio dell'Accademia Nazionale dei Lincei. Il premio consente anche di usufruire di 5000.00 Euro da utilizzare come fondi di ricerca (2019).

4) **Vincitore del "Young Physico-Chemist award"** erogato dalla Divisione di Chimica-Fisica della Società Chimica Italiana (2018).

3) **Vincitore del premio poster alla scuola "Path Integral School"**, tenutasi dal 13 al 17 Giugno a Lausanne, consistente inoltre in un premio di 200.00 Euro (2016).

2) **Primo Classificato al Premio di Laurea Italo Martina** promosso dal Rotary Club Milano Duomo del Rotary International, consistente in 1250.00 Euro (2014).

1) **Quinto Classificato alla fase Nazionale dei Giochi della Chimica** (2010).

## INDICATORI BIBLIOMETRICI COMPLESSIVI

Numero totale di pubblicazioni: 21
Numero totale di citazioni: 258 (Scopus), 327 (Google Scholar)
Indice H: 10

### ARTICOLI DI DIVULGAZIONE SCIENTIFICA

1) C. Aieta, **G. Di Liberto**, F. Gabas, R. Conte, M. Ceotto "Chimica Teorica e Crescita Ecosostenibile: Un Viaggio a Bordo di un Nanomotore Guidato da Martin Karplus", *Nuova Energia* **2** (2016).

2) Traduzione integrale da Inglese ad Italiano di un libro di divulgazione scientifica.

### ATTIVITA' COME REVIEWER

A partire dal 2019 ho prestato attività come revisore di articoli delle riviste *RSC Advances*, *Solar Energy, Applied Surface Science, Entropy* attive nel campo della chimica teorica e computazionale, e nel campo della scienza dei materiali.

## PRESENTAZIONE DI CONTRIBUTI ORALI

Ho Presentato 6 contributi orali a conferenze ed Università.

6) **G. Di Liberto**, S. Tosoni and G. Pacchioni "Theoretical description of $TiO_2$-based heterojunctions: insights from DFT" Universitat de Barcelona (2019). **(Seminario)**

5) **G. Di Liberto**, S. Tosoni, G. Pacchioni, "Role of heterojunction in coexposed anatase (001)-(101) surfaces", SP7 International Conference of Semiconductor Photochemistry, Milano (2019). **(Flash Talk)**

4) **G. Di Liberto**, S. Tosoni, G. Pacchioni, "Theoretical description of $TiO_2/TiO_2$ and $BiVO_4/WO_3$ heterojunctions: insights from DFT", Conferenza della Divisione di Chmica-Fisica SCI, Roma (2019). **(Contributed Talk)**

3) **G. Di Liberto**, F. Gabas, R. Conte, and M. Ceotto, "Divide-andConquer Semiclassical Dynamics: A Viable Method for Vibrational spectra Calculations of High Dimensional and Anharmonic Molecular Systems", Conferenza della Divisione di Chmica-Fisica SCI, Bologna (2018). **(Contributed Talk)**

2) **G. Di Liberto**, R. Conte, and M. Ceotto, "A Semiclassical Divide and Conquer method for Spectroscopic calculations of high dimensional molecular systems", Workshop on Understanding Quantum Phenomena with Path Integrals: From Chemical Systems to Quantum Fluids and Solids, Trieste (2017). **(Flash Talk)**

1) **G. Di Liberto** and M. Ceotto, "Accurate and Efficient Prefactors for the Semiclassical Initial Value Representation Propagator", Different Routes to Quantum Dynamics, Lausanne (2016). **(Contributed Talk)**

**PRESENTAZIONE DI CONTRIBUTI POSTER**

Ho Presentato 7 contributi poster a conferenze ed Università. Sono inoltre co-autore di ulteriori 21 contributi comprendenti Orali e Poster a conferenze nazionali ed internazionali presentati da collaboratori.

7) **G. Di Liberto**, S. Tosoni, G. Pacchioni, "Role of heterojunction in coexposed anatase (001)-(101) surfaces", SP7 International Conference of Semiconductor Photochemistry, Milano (2019).

6) **G. Di Liberto**, F. Gabas, R. Conte, and M. Ceotto, "Divide-andConquer Semiclassical Dynamics: A Viable Method for Vibrational Spectra Calculations of High Dimensional and Anharmonic Molecular Systems", Conferenza della Divisione di Chmica-Fisica SCI, Bologna (2018).

5) **G. Di Liberto**, R. Conte, F. Gabas, and M. Ceotto, "Divide-andConquer Semiclassical Dynamics: A Viable Route for Spectroscopic Calculations of High Dimensional Molecular Systems", International Congress of Quantum Chemistry, Menton (2018).

4) **G. Di Liberto**, R. Conte, and M. Ceotto, "A Semiclassical Divide and Conquer method for Spectroscopic calculations of high dimensional molecular systems", Workshop on Understanding Quantum Phenomena with Path Integrals: From Chemical Systems to Quantum Fluids and Solids, Trieste (2017).

3) **G. Di Liberto**, and M. Ceotto "Accurate and efficient prefactors for the semiclassical initial value representation propagator", MolSimEng, Milano (2016).

2) **G. Di Liberto**, and M. Ceotto, "Accurate and Efficient Prefactors for the Semiclassical Initial Value Representation Propagator", Path Integral School, Lausanne (2016).

1) **G. Di Liberto**, and M. Ceotto, "Accurate and Efficient Prefactors for the Semiclassical Initial Value Representation Propagator", Different Routes to Quantum Dynamics, Lausanne (2016).

## LINEE DI RICERCA

La mia attività di ricerca si colloca nel campo della chimica teorica e computazionale. In particolare, i miei studi si collocano all'interno della seguente linea di ricerca:

Studio computazionale di nanomateriali basati su semiconduttori applicati alla fotochimica, sensoristica, energetica ed alla rimozione di inquinanti. Durante i miei primi anni di ricerca mi sono occupato del design di nanomateriali a base $TiO_2$ dopati con metalli e non metalli. Successivamente, durante il periodo di post-dottorato mi sono occupato della modellizzazione di strutture complesse basate sul contatto (heterojunctions) tra due o più semiconduttori. Inoltre, attualmente il mio interesse nel campo dei semiconduttori comprende anche lo sviluppo e l'applicazione di metodologie computazionali che da un lato consentano una migliore descrizione della struttura elettronica e dall'altro, non richiedano un significativo aumento dei tempi di calcolo, rispetto all'approccio convenzionale.

## ULTERIORI COMPETENZE

**COMPETENZE LINGUISTICHE**

Madrelingua: Italiano.
Lingua straniera inglese: Certificato IELTS livello B2 (2015).

**COMPETENZE INFORMATICHE**

Programmazione: Fortran 77, Fortran 90, C (BASE).
Sistemi operativi: Linux/Unix, Windows.
Sofware di Chimica Computazionale e calcolo Scientifico: GAUSSIAN, Matlab (BASE), QUANTUMESPRESSO, VASP, VMD, VESTA, CRYSTAL, NWCHEM.
Altri: Microsoft office, Libreoffice, Lyx.

**ULTERIORI COMPETENZE NEL CAMPO DELLA DIDATTICA E RICERCA**

3) Nel periodo 2018-2019 ho seguito e superato i seguenti esami, per incrementare le mie conoscenze e competenze nel campo della didattica.

Psicologia dell'apprendimento (9 CFU) – M-PSI/04
Teoria e metodi di progettazione e valutazione didattica (9 CFU) – M-PED/03
Didattica speciale (9 CFU) – M-PED/04

2) Nel 2016 ho partecipato alla scuola "Path Integral" presso il CECAM di Lausanne. Durante la scuola sono stato insignito di un poster award di 200 Euro.

1) Nel periodo 2014-2017 ho frequentato i seguenti corsi presso il Dipartimento di Fisica dell'Università degli Studi di Milano per accrescere le mie conoscenze di base. (Metodi Matematici della Fisica, Teoria dei Sistemi a Multicorpi, Fisica Statistica, Fisica dei solidi, Quantum Theory of Matter)

Data:

16/09/2020

Giovanni Di Liberto