

Francesco Cosimo Castellucci

✉ E-Mail: francescocosimo.castellucci@unimore.it

in Profilo LinkedIn

git GitLab: <https://gitlab.com/furan33>

🌐 Webpage: <https://unimore.unifind.cineca.it/get/person/112699>

In qualità di Dottorando in Fisica presso Unimore, con incarico di collaborazione presso il CNR-NANO e specializzazione in **Fisica della Materia Condensata**, durante il mio percorso accademico ho acquisito approfondite conoscenze in **Fisica dello Stato Solido**, **Teoria Quantistica a Molti Corpi** e **Transizioni di Fase**. I miei interessi di ricerca si concentrano sulla fisica della materia condensata teorica e computazionale, arricchiti da esperienza in ambito sperimentale. Ho sviluppato competenze di programmazione in **Python** e **Fortran**, oltre a una buona padronanza di diversi **software specializzati per il calcolo della struttura elettronica da principi primi**. In particolare, mi occupo attualmente dello studio delle **proprietà elettroniche e ottiche dei materiali nanostrutturati** tramite metodi basati sul funzionale della densità e sulla teoria perturbativa a molti corpi, con l'obiettivo di sviluppare e applicare strumenti avanzati di **Machine Learning e Deep Learning**.

Istruzione

- 2024 – 20XX ♦ **Dottorato di Ricerca in Fisica e Nanoscienze, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia**
- Titolo della tesi: *Machine Learning methods applied to GW calculations*
 - Supervisor: *Prof.ssa Elisa Molinari, Dott. Andrea Ferretti, Dott. Daniele Varsano*
- 2022 – 2024 ♦ **Laurea Magistrale in Fisica, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia**
- Voto finale: *110/110 con lode e menzione accademica*
 - Curriculum: *Fisica Teorica e Computazionale*
 - Titolo della tesi: *A Machine Learning approach for the screened potential in GW approximation*
 - Relatori: *Prof.ssa Elisa Molinari, Dott. Andrea Ferretti, Dott. Daniele Varsano, Dott.ssa Giorgia Franchini*
 - Descrizione: *Implementazione di un modello di Machine Learning, basato sul Deep Learning, per accelerare il calcolo delle funzioni di risposta lineare nell'approssimazione GoWo per i materiali 2D. La nuova metodologia è implementata nel codice community Yambo*
- 2019 – 2022 ♦ **Laurea Triennale in Fisica, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia**
- Voto finale: *110/110 con lode*
 - Titolo della tesi: *Study of magnetic properties in 2D systems using Monte Carlo methods*
 - Relatore: *Prof. Marco Gibertini*
 - Descrizione: *Esecuzione di accurate simulazioni Monte Carlo per studiare le proprietà magnetiche e le transizioni di fase in sistemi 2D descritti dal modello di Ising, con differenti simmetrie reticolari, numero di siti e di strati*

Progetti

- 2026 ♦ **Tutorial: Calculating the Transport Properties (Thermal & Ionic) of $v\text{-Li}_x\text{Si}_{1-x}$ Glasses via Machine Learning Interatomic Potentials (MLIPs) and Equilibrium Molecular Dynamics (EMD):** Sviluppo di un tutorial e workflow computazionale (pubblicato su GitLab) per simulare e calcolare le proprietà di trasporto ionico e termico nei vetri di litio-silicio, combinando potenziali interatomici basati su Machine Learning e Dinamica Molecolare all'Equilibrio.
- 2025 ♦ **ISCRA B - CoPI:** «Machine Learning methods applied to GW calculations for 2D materials» (acronimo: AMALGAMA), PI: Andrea Ferretti, 200k ore GPU, Leonardo-Booster@CINECA
- ♦ **ISCRA C - PI:** «Enhancing the Computational Efficiency of 2D Materials Simulations via Machine Learning» (acronimo: ECE2DvML), PI: Francesco Cosimo Castellucci, 10k ore GPU, Leonardo-Booster@CINECA

Progetti (continued)

- 2023
- ◇ **Meta-GGA implementation in the atomic AGWX code:** Implementazione del funzionale TPSS meta-GGA all'interno del codice atomico AGWX; la qualità dei risultati è stata valutata confrontando il potenziale di ionizzazione per l'atomo di He con quello ottenuto con i funzionali standard PBE (GGA) tramite Quantum Espresso. Supervisor: Prof.ssa Alice Ruini, Dott. Andrea Ferretti
 - ◇ **Study of LiH using the Variational Quantum Eigensolver and GoWo@PBE:** Studio del potenziale di ionizzazione verticale per il LiH tramite il codice West (con GoWo@PBE), utilizzando un computer quantistico simulato per migliorare la distanza interatomica nell'approssimazione HF. Supervisore: Prof. Marco Govoni

Competenze

- Lingue
- ◇ - **Italiano** (madrelingua)
 - **Inglese** (Livello QCER C1 nel 06/2024 presso CLA Unimore, Livello QCER B2 nel 03/2019 tramite Cambridge PET)
- Programmazione
- ◇ - Sviluppo software e scripting in **Python, Fortran, Bash** e **MATLAB**
 - Contributo attivo allo sviluppo del codice atomico MBPT AGWX in Fortran
- Altro
- ◇ - Implementazione di modelli di **Machine Learning** e **Deep Learning** applicati alla fisica computazionale, dalla solida base teorica all'applicazione pratica in Python
 - Utilizzo avanzato di software da principi primi per la struttura elettronica: **Quantum ESPRESSO, Yambo, WEST, Qbox** e **ASE**
 - Calcolo parallelo e ottimizzazione in ambienti **HPC** (MPI, OpenMP, tool di profilazione e debugging)
 - Elaborazione dati e redazione scientifica: **LaTeX, Igor Pro** e pacchetti **Microsoft Office**

Conferenze/Workshops/Scuole/Corsi Esterni

- 8 - 11 Giugno 2026
- ◇ **Recent Advances in Computer-Aided Spectroscopy 2026**, CNR-NANO & Unimore, Modena, Italia
- 16 - 19 Marzo 2026
- ◇ **Debugging and Optimization of Scientific Applications**, CINECA Academy, Casalecchio di Reno, Bologna, Italia
- 09 - 13 Giugno 2025
- ◇ **School on Machine Learning for Molecules and Materials Research**, Zadar, Croazia (contributo poster)
- 05 - 06 Giugno 2025
- ◇ **CNR-NANO Institute 4th workshop**, Modena, Italia (contributo poster)
- 19 - 23 Maggio 2025
- ◇ **Yambo School on Many-Body Perturbation Theory and Excited-State Simulations**, CNR-NANO, Modena, Italia (attività di tutorato)
- 5 - 7 Marzo 2025
- ◇ **Introduction to Parallel Computing with MPI and OpenMP**, CINECA Academy, Casalecchio di Reno, Bologna, Italia
- 8 - 10 Gennaio 2025
- ◇ **22nd International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods**, ICTP, Trieste, Italia
- 26 - 28 Novembre 2024
- ◇ **YAMBO developers' meeting 2024**, Modena, Italia (contributo orale)

Attività Didattica

- 2024 - 20XX
- ◇ **Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia**, attività di tutorato in Fisica Generale per gli studenti del Corso di Laurea Triennale in Fisica, dalla Meccanica alla Termodinamica, teoria ed esercizi (40 ore)

Attività Didattica (continued)

- 2023 - 2024 ♦ **Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia**, attività di tutorato in Fisica Generale per gli studenti del Corso di Laurea Triennale in Ingegneria del Veicolo, dalla Meccanica all'Elettromagnetismo, teoria ed esercizi (60 ore)

Corsi Interni di Dottorato

- 2026 ♦ **Ab initio spectroscopy**, Prof.ssa Cocchi
 ♦ **An introduction to Python: from fundamentals to data and HPC**, Dott. Spallanzani e Prof. Govoni
- 2025 ♦ **Theory and numerical simulation of mass, charge and heat transport**, Prof. Baroni e Dott. Grasselli
 ♦ **Introduction to random variables and complex systems**, Dott. Petri
 ♦ **Introduction to the renormalization group and critical phenomena**, Prof. Trancanelli
 ♦ **Management of scientific projects**, Unimore
- 2024 ♦ **Elements of quantum technologies**, Prof. Affronte
 ♦ **Publish or perish**, Unimore

Terza Missione

- 25 febbraio 2025 ♦ **Unimore Orienta 2025**: Partecipazione all'Open Day del dipartimento FIM di Unimore in qualità di testimonial per i corsi di Laurea Triennale, Magistrale e di Dottorato in Fisica; le attività hanno compreso una presentazione, sessioni di Q&A e sessioni poster
- 2024 - 2025 ♦ **La ricerca in Fisica**: Partecipazione alla sessione poster organizzata dal Dipartimento di Fisica riguardante i temi di ricerca per gli studenti dei corsi di Laurea Triennale e Magistrale

Referenze

- Supervisore di Dottorato ♦ **Prof.ssa Elisa Molinari** - elisa.molinari@unimore.it
 Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia
- ♦ **Dott. Andrea Ferretti** - andrea.ferretti@nano.cnr.it
 Centro S3, Istituto Nanoscienze del CNR, Modena
- ♦ **Dott. Daniele Varsano** - danielle.varsano@nano.cnr.it
 Centro S3, Istituto Nanoscienze del CNR, Modena

Seminari

- ♦ "A tale of quantum science and simulations: Quantum Espresso past and future", Stefano Baroni
- ♦ "Molecular defects in N-based systems: Common threads and future directions", Jonathan Pellicciari
- ♦ "Ion transport in battery materials: Computational methodology and applications", Yoshitaka Tateyama
- ♦ "Many-body interactions in photo-excited lead-free perovskites", Costanza Borghesi
- ♦ "Challenges and Opportunities for Electronic Structure Calculations at Exascale", William Dawson
- ♦ "From first-principles to ML-accelerated molecular dynamics: Quantitative predictive modelling of disordered materials for memory and energy applications", Guido Ori
- ♦ "Superconducting Electronics with Indium Arsenide On Insulator (InAsOI)", Giovanni Paghi

Seminari (continued)

- ◇ "Quantum information processing with hole-spin qubits in silicon", Gaia Forghieri
- ◇ "Functional theory of the occupied spectral density", Andrea Ferretti
- ◇ "A personal journey through the middle earth between quantum and classical physics: gas phase synthesis and studies of nanoparticles", Sergio D'Addato
- ◇ "Nanostructured and Functionalized Surfaces for Single-Molecule Detection", Gaetano Scamarcio
- ◇ "How to Design an Award-Winning Scientific Poster" webinar, ECOSISTER PILLAR TRAINING
- ◇ "Grant Graphics Masterclass: Visuals That Win Fundings" webinar, ECOSISTER PILLAR TRAINING
- ◇ "Modeling Molecular Crystals with Machine Learning Interatomic Potentials", Ivor Lončarić
- ◇ "Permanent condensation of excitons in two dimensions", Massimo Rontani