

Dichiarazione di veridicità

Dichiarazione sostitutiva di certificazioni ai sensi dell' art. 46 del D.P.R. 445 del 28/12/2000

Dichiarazione sostitutiva dell'atto di notorietà ai sensi dell' art. 47 del D.P.R. 445 del 28/12/2000

Il sottoscritto Federico Grasselli, nato a Reggio nell'Emilia il 15/09/1989, residente a Reggio Emilia in via B. Corti 1, DICHIARA, sotto la propria responsabilità e consapevole delle sanzioni penali previste agli artt. 75 e 76 del D.P.R. 445/2000 in caso di dichiarazione mendace, che quanto contenuto nel presente curriculum vitae et studiorum è corrispondente al vero, nonché di essere in possesso di tutti i titoli in esso riportati.

Curriculum Vitae et Studiorum (aggiornato a 31.05.2026)

SOMMARIO

1.	Informazioni personali	pag. 1
2.	Interessi scientifici	pag. 2
3.	Posizioni ricoperte	pag. 3
4.	Titoli di studio	pag. 3
5.	Finanziamenti europei	pag. 4
6.	Progetti di calcolo ad alte prestazioni (HPC)	pag. 4
7.	Premi e riconoscimenti	pag. 4
8.	Visite scientifiche	pag. 4
9.	Contributi orali su invito a conferenze / scuole internazionali	pag. 5
10.	Ulteriori contributi a conferenze / scuole internazionali	pag. 5
11.	Organizzazione di conferenze, scuole e workshop	pag. 6
12.	Partecipazione a scuole e workshop	pag. 6
13.	Revisore per progetti di supercalcolo	pag. 7
14.	Revisore per riviste scientifiche	pag. 7
15.	Membro di commissioni giudicatrici	pag. 7
16.	Attività didattica	pag. 7
17.	Attività di supervisione e tutoraggio	pag. 8
18.	Competenze linguistiche	pag. 8
19.	Competenze computazionali	pag. 8
20.	Attività di comunicazione / outreach	pag. 8
21.	Pubblicazioni	pag. 9
22.	Monografie e capitoli su volume	pag. 10
23.	Manoscritti in corso di revisione	pag. 10
24.	Indicatori bibliometrici	pag. 11
25.	Altri interessi	pag. 11

1. INFORMAZIONI PERSONALI

Nome: Federico

Cognome: Grasselli

Data di nascita: 15/09/1989

Luogo di nascita: Reggio Emilia (RE), Italia

Nazionalità: italiana

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4284-0094>

Scopus Author ID: [56531789400](https://orcid.org/0000-0003-4284-0094)

ResearcherID: [V-6384-2019](https://orcid.org/0000-0003-4284-0094)

Google Scholar: <https://scholar.google.com/citations?user=fdq93WkAAAAJ&hl=it>

2. INTERESSI SCIENTIFICI

La mia attività scientifica, nell'ambito della **teoria quantistica della materia**, è rivolta allo scattering quantistico in sistemi a dimensionalità ridotta, alla teoria quantistica dei solidi e alle nanosienze teoriche, nonché alla formulazione ab initio della teoria dei fenomeni di trasporto e alle proprietà termodinamiche delle fasi condensate, dai materiali per l'energia sino alla materia in condizioni planetarie.

La mia attività teorico-computazionale si caratterizza, in particolare, per approcci ibridi volti a **combinare considerazioni teoriche analitiche con metodi numerici avanzati** e, più recentemente, di *machine learning* (ML), cercando così di colmare il divario tra modelli fisici e approcci *data-driven*.

Dal punto di vista metodologico, privilegio lo sviluppo e l'utilizzo di codici ottimizzati per il **calcolo ad alte prestazioni** (HPC), nonché l'implementazione, nelle simulazioni atomistiche, di **strategie ML** che sfruttino ontologie e **suite software largamente condivise** dalla comunità di scienze dei materiali a livello internazionale.

Nel corso del mio dottorato, collocato entro il progetto Marie Curie INDEX ITN-Project sugli **eccitoni indiretti**, ho studiato l'evoluzione unitaria di coppie elettrone-lacuna in nano-dispositivi a semiconduttore, risolvendo l'equazione di Schrödinger non relativistica dipendente dal tempo per due particelle in una e due dimensioni. Ciò ha richiesto lo sviluppo di software ad alte prestazioni (HPC) ottimizzato per **architetture massicciamente parallele**. Ho anche implementato un approccio originale basato su una self-energy in approssimazione locale per trattare i gradi di libertà interni dell'eccitone, predicendo la rinormalizzazione dei coefficienti di scattering dovuta alle **correlazioni interne** e riducendo drasticamente il tempo di calcolo. Ho inoltre rafforzato la mia predisposizione al lavoro con **équipe sperimentali** tramite una visita scientifica presso il laboratorio del Prof. L.V. Butov alla University of California – San Diego, riferimento a livello mondiale per lo studio sperimentale degli eccitoni indiretti, e una collaborazione con il gruppo del Prof. G. Rossi al TASC e Elettra/Fermi sulla statistica dei polarimetri di spin, terminata con una pubblicazione su rivista.

La mia successiva attività di ricerca come assegnista postdoc presso la SISSA di Trieste, all'interno del centro di eccellenza europeo "*MAX EU Centre of Excellence for HPC applications*", si è focalizzata sullo studio delle **proprietà di trasporto** di carica e calore in sistemi isolanti elettronici, tramite il formalismo di Green-Kubo della risposta lineare. Ho dimostrato come la quantizzazione topologica del trasporto di carica e la invarianza di gauge dei coefficienti di trasporto possano esser combinati al fine di ottenere stime semplici, ma accurate a livello di teorie a principi primi, della conducibilità elettrica in liquidi isolanti. Ho inoltre sviluppato un protocollo di **calcolo ab initio delle conducibilità** termica ed elettrica dell'acqua in condizioni planetarie con tecniche HPC.

Durante i quattro anni presso il "Laboratory of Computational Science and Modeling" (COSMO) presso l'EPFL di Losanna, presso il quale sono stato **Marie Skłodowska-Curie fellow** da giugno 2021 a maggio 2023, mi sono occupato della stima della **robustezza** delle predizioni dei **modelli ML** e di applicazioni del ML a simulazioni di proprietà di trasporto in **elettroliti a stato solido** per le batterie di nuova generazione. Ho inoltre supervisionato lo sviluppo di un approccio ML per realizzare simulazioni di dinamica molecolare dei metalli a temperatura elettronica non nulla, nonché un progetto sulla stima dell'**incertezza per modelli ML**.

Conscio dell'importanza della disseminazione di metodi e codice, della definizione di standard ed ontologie comuni, e della necessità di favorire l'interconnessione tra i diversi gruppi di scienze computazionali dei materiali, ho organizzato tre **workshop su simulazioni atomistiche e ML** e sono stato tra i proponenti di una **COST action** europea sull'uso di tecniche *data-driven* per l'ingegnerizzazione di materiali funzionali, per la quale attualmente ricopro i ruoli di membro del *Management Committee* per la Svizzera, di *Science Communication Coordinator* e di *vice-leader* per il working group su *Training, Dissemination, Exploitation, and Outreach*.

Attualmente sono Ricercatore Tenure Track in Fisica Teorica della Materia Condensata presso il Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche dell'Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia.

3. POSIZIONI RICOPERTE

Dal 01/06/2024: Ricercatore Tenure Track (RTT) presso il Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche dell'Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, SSD FIS/03 – Fisica della Materia.

01/06/2021 – 31/05/2024: Postdoc (Collaborateur Scientifique) nel gruppo del Prof. Michele Ceriotti presso il Laboratory of Computational Science and Modelling (COSMO), IMX, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne (CH).

01/06/2021 – 31/05/2023: Marie Skłodowska Curie fellow nel gruppo del Prof. Michele Ceriotti presso il Laboratory of Computational Science and Modelling (COSMO), IMX, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne (CH).

01/06/2020 – 31/05/2021 – Postdoc (Collaborateur Scientifique) nel gruppo del Prof. Michele Ceriotti presso il Laboratory of Computational Science and Modelling (COSMO), IMX, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne (CH).

17/05/2020 – 31/05/2020 – Visiting scientist presso il gruppo del Prof. S. Baroni alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Condensed Matter Theory Group, Trieste (IT).

16/05/2017 – 15/05/2020 – Assegnista di Ricerca Postdoc presso il gruppo del Prof. S. Baroni alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Condensed Matter Theory Group, Trieste (IT). Finanziamento da parte del EU Centre of Excellence “MaX: Driving the Exascale Transition”

06/03/2017 – 05/04/2017 - Collaborazione occasionale per l'attività di comunicazione scientifica e gestione del progetto per il “Laboratorio Nanoscienze” del CNR Nano S3 all'interno del progetto della Fondazione Cassa di Risparmio di Modena “Into the Future”, indirizzato agli studenti delle scuole superiori della Provincia di Modena

01/01/2014 – 31/12/2016 – Borsa ministeriale di Dottorato di Ricerca in “Physics and Nanosciences” alla School of Graduate Studies in Physics and Nanosciences, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia. Discussione della tesi in data 03/03/2017.

4. TITOLI DI STUDIO

03/03/2017 – Dottore di Ricerca (PhD) in Physics and Nanosciences (XXIX Ciclo) (cum laude), School of Graduate Studies in Physics and Nanosciences, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, Italia. L'attività di dottorato è stata parzialmente finanziata dalla Marie Skłodowska-Curie INDEX ITN action sugli eccitoni indiretti.

- Titolo della tesi: *“Time-dependent propagation of quantum complexes: the case of indirect excitons in semiconductor heterostructures”*.
- Supervisor: Prof. Guido Goldoni.
- Ambito: Fisica teorica della materia condensata.

29/10/2013 - Laurea Magistrale in Fisica (110/110 con lode), Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, Italia.

- Titolo della tesi: *“Schemi di propagazione coerente per eccitoni spazialmente indiretti”*.
- Relatore: Prof. Guido Goldoni.
- Ambito: Fisica teorica della materia condensata.

28/10/2011 - Laurea in Fisica (110/110 con lode), Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, Italia.

- Titolo della tesi: *“Analisi di FePc, adsorbite su Au(110), con tecniche STM, STS, e di break-junction”*.
- Relatore: Prof. Giorgio Rossi.
- Ambito: Fisica sperimentale della materia condensata.

2008 - Diploma di maturità scientifica (100/100 con lode), Liceo Classico-Scientifico “Ariosto-Spallanzani” Reggio Emilia, Italia.

5. FINANZIAMENTI EUROPEI

COST Action CA22154: “Data-driven Applications towards the Engineering of functional Materials: an Open Network (DAEMON)”. <https://www.cost.eu/actions/CA22154/>. Punteggio 45/50. Data d’inizio: 26 settembre 2023. Ruoli:

- *Secondary Proposer* della action;
- *Management Committee Member* per la Svizzera;
- *Scientific Communication Coordinator*.

Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowship: European Action 2020 “TRANQUIL: TRANsport with QUantum nuclei in Ionic Liquids”. Proposal number: 101018557. Punteggio: 97.00/100.00.

6. PROGETTI DI CALCOLO AD ALTE PRESTAZIONI (HPC)

CSCS Production Project: “A machine learning study of the dissociation of water on Li3PS4 surfaces” (320,000 Node hours on CSCS Cray XC50 – Hybrid system), approvato presso il Centro Svizzero di Calcolo Scientifico - CSCS (01 ottobre 2023 - 30 settembre 2024).

ISCRA C: “Quantum Dynamics of COMposite Particles”(acronym: QDCOMP), approvato e finanziato presso il cluster di supercalcolo del CINECA HPC systems, Tier-1 IBM NeXtScale ‘Galileo’ (2016-2017).

ISCRA C: “Fully QUantum Dynamics of 2D Indirect eXcitons”(acronym: FUQUDEX), approvato e finanziato presso il cluster di supercalcolo del CINECA HPC systems, Tier-1 IBM NeXtScale ‘Galileo’ (2015-2016).

7. PREMI E RICONOSCIMENTI

25/02/2026: IoP trusted reviewer certificate

07/03/2025: Abilitazione Scientifica Nazionale II Fascia

09/09/2021: Runner-up prize, 5th Psi-K Volker Heine Young Investigator Award. Vedasi: <https://www.psi2020.net/volker-heine-young-investigator-award>

AA.AA. 2012-13, 2010-11, 2009-10, 2008-09: Premio universitario al merito “Premio di Studio” emesso dalla Università di Modena e Reggio Emilia

AA.AA. 2012-13, 2011-12, 2010-11, 2009-10, 2008-09: Premio universitario al merito “Fondo Sostegno Giovani” (rimborso del 50% delle tasse universitarie per meriti nei corsi di laurea e laurea magistrale in Chimica, Fisica e Matematica)

2008: Premio nazionale per aver ottenuto la lode all’esame di Stato (maturità scientifica)

2008: Premio scolastico “A. Iona” del Liceo Classico-Scientifico "Ariosto-Spallanzani" per la valutazione più alta dell’Istituto in Matematica, Fisica e Scienze (A.S. 2007-08)

8. VISITE SCIENTIFICHE

Febbraio-marzo 2023: Visiting scientist + Corso PhD su “Machine Learning Interatomic Potentials”. School of Graduate Studies “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia.

08-14 ottobre 2022: Visiting scientist presso il gruppo del Prof. Paul Erhart presso l’Università Chalmers di Goteborg, Svezia.

17-31 maggio 2020: Visiting scientist presso il gruppo del Prof. S. Baroni alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Condensed Matter Theory Group, Trieste (IT).

14-26 giugno 2019: Visiting scientist presso il gruppo del Prof. L. Stixrude - University of California – Los Angeles (USA), come parte di un progetto tuttora in corso.

19 novembre – 2 dicembre 2018: Visiting scientist presso il gruppo del Prof. L. Stixrude - University of California – Los Angeles (USA).

3 giugno – 3 luglio 2015: Visiting scientist presso il gruppo del Prof L. V. Butov - University of California – San Diego (USA), all’interno delle attività del dottorato di ricerca.

Maggio – giugno 2011: Tirocinio formativo presso il gruppo del Prof. G. Rossi a Elettra/Fermi e TASC (Trieste), come parte del corso di laurea in Fisica.

9. CONTRIBUTI ORALI SU INVITO A CONFERENZE / SCUOLE INTERNAZIONALI

03/10/2024, “Simulating transport properties of superionic materials”, TimeMan Seminar Series, Lille University (FR) (online).

18/04/2024, “Trustworthy machine learning for materials”, ECT* Workshop - Bridging scales: At the crossroads among renormalisation group, multi-scale modelling, and deep learning – 15-19/04/2024, Trento.

11/04/2024, “An Introduction to DAEMON COST Action”, EuMINe COST Action 1st General Meeting and Workshop, 10-12/04/2024, Bologna.

06/06/2023, “Predicting the electronic free energy at finite temperature from ground state data”, CMT@BRIXEN, The meeting of the condensed matter theory Italian community, 05-07/06/2023, Bressanone.

23/01/2023, “Ab initio charge transport of ionic fluids: invariance principles and topological invariants”, Lennard-Jones Centre Discussion Group (University of Cambridge), “Monday Seminar”.

24/06/2022. “Invariance principles of transport coefficients and thermal transport in super-ionic materials”, Telluride Science Research Center’s Workshop “Thermal Transport at the Nanoscale”, 21-25/06/2022, Telluride, Colorado (USA).

06/12/2021. “The role of invariance principles and topology in the ab initio charge transport of ionic fluids”, CECAM Workshop: Capturing Anharmonic Vibrational Motion in First-Principles Simulations (online).

09/09/2021. “Invariance principles and topology in the ab initio charge transport of ionic fluids”, 5th Psi-K Volker Heine Award Ceremony (online).

07/04/2020. “Heat and charge transport in water at ice-giant conditions from ab initio MD simulations”, ICTP Atomistic Webinar, Trieste.

24/07/2019. “Topological quantisation and gauge invariance of charge transport in liquid insulators”, CPMD Meeting 2019 - Pushing the Boundaries of Molecular Dynamics, CECAM Headquarters, Losanna (CH).

21/05/2019. “Topological quantization and gauge invariance of charge transport in liquid insulators”, 2019 Workshop on Recent Developments in Electronic Structure, University of Illinois at Urbana-Champaign (USA).

01/11/2018. “Charge-transport quantization and gauge invariance of electrical conductivity in ionic fluids”, International Conference “Games of Materials”, Dubrovnik (HR).

03/10/2015. “La discretitud del tiempo”, International Conference “Ibn Arabi y Lull a la luz de la matemática y la física actuales”, Facultad de Ciencias – UNED, Madrid (ES).

10. ULTERIORI CONTRIBUTI A CONFERENZE / SCUOLE INTERNAZIONALI [O: Orale; P: Poster]

O: “Predicting hot-electron free energies from ground-state data”, APS March Meeting 2023, Las Vegas, Nevada (USA), 08/03/2023

P: “Predicting hot-electron free energies from ground-state data”, 21st International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods | (smr 3814) @ ICTP. Trieste (IT), 11-13/01/2023

P: “Simulating transport coefficients of superionic conductors: Finite-size effects in ion dynamics and heat conduction”, Psi-K Conference, 22-25/08/2022, SwissTech Center, EPFL, Lausanne (CH)

O: Web-presentation “Ab initio simulation of heat and charge transport in water at planetary pT conditions”, APS March Meeting 2020, Denver, Colorado (USA) 03/03/2020 (meeting fisico cancellato per l'emergenza sanitaria COVID-19; web: <http://meetings.aps.org/Meeting/MAR20/Session/J40.7>)

P: “Charge-transport quantization and gauge-invariance of electrical conductivity in ionic fluids”, 19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods | (smr 3266) @ICTP, Trieste (IT), 09/01/2019

- O: “*Space-and-time coherent evolution of spatially indirect excitons: the role of the internal dynamics*”, Materials.it, Bologna (IT), 24/10/2018
- O: “*Electrical conductivity and charge-transport quantization in ionic fluids*”, Materials.it, Bologna (IT), 22/10/2018
- O: “*Quantum propagation of a correlated electron-hole pair in semiconductor heterostructures*” – FisMat, ICTP, Trieste (IT) ottobre 2017
- O: “*Space-and-time-dependent propagation of a composite particle*” – SISSA, Trieste (IT), 16/02/2017
- O: “*Picosecond timescale scattering of an electron-hole pair in semiconductor heterostructures*”, 68th School in Solid State Physics: The Free Electron Laser for Ultrafast Imaging at the Nanoscale – Erice (IT), 09/06/2016
- O: “*Time-dependent simulation of scattering of a quantum complex with internal excitations*”, at the International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE) – Atene (GR), 24/05/2016
- O: “*Time Dependent Quantum Dynamics of 2D Spatially Indirect Excitons*”, in Collective Electronic Excitations in 2D (CEE2D) Conference – Pisa (IT), 24/09/2015.
- O: “*Time-Dependent Quantum Dynamics of 2D Spatially Indirect Excitons*” – UCSD Physics Department, San Diego, California (USA), 12/06/2015.
- P: “*Time-dependent quantum dynamics of 1D indirect excitons*” in “International Conference on Physics of Light-Matter Coupling in Nanostuctures (PLMCN)” – Montpellier (FR), 9-13 giugno 2014

11. ORGANIZZAZIONE DI CONFERENZE / WORKSHOP

- 25-28/11/2025** CECAM-Psi-K Flagship Workshop “Uncertainty quantification in atomistic modeling: From uncertainty-aware density functional theory to machine learning”, Lausanne (CH). See: <https://www.cecarn.org/workshop-details/1380>
- 9-13/06/2025** CECAM-Psi-K Flagship School “School on Machine Learning for Molecules and Materials Research”, Zadar (HR). See: <https://www.cecarn.org/workshop-details/1379>
- 5-6 febbraio 2024** DAEMON COST Action CA22154 General Meeting 2024, Binario F, Stazione Termini, Roma. Vedasi: https://cost-daemon.eu/?page_id=168
- 6-10 novembre 2023** (accettata e finanziata): Scuola ibrida in presenza/on-line CECAM-Psi-K dal titolo “*School on Machine Learning Interatomic Potentials (ML-IP 2023)*”, Aalto University, Espoo, Finlandia. Vedasi: <https://www.cecarn.org/workshop-details/1213>
- 23-26 maggio 2023**: CECAM-Psi-K Flagship School on “*Young Researchers' School on Theory and Simulation in Electrochemical Conversion Processes*”, organizzata in presenza presso l'Ecole Normale Supérieure, Parigi. Vedasi: <https://www.cecarn.org/workshop-details/1216>
- 15-18 novembre 2021**: Workshop on-line destinato a (e organizzato da) giovani ricercatori dal titolo “*Machine-Learning Interatomic Potentials*”, approvato e finanziato dalla fondazione Psi-K. Vedasi: www.mlip-workshop-2021.xyz

12. PARTECIPAZIONE A SCUOLE E WORKSHOP

- 2024**: COST Academy Science Communicator Workshop, Bruxelles, 6-7 marzo 2024.
- 2023**: COST Academy Leadership Workshop, Bruxelles, 8 settembre 2023.
- 2022**: Workshop “*Thermal Transport at the Nanoscale*”, Telluride, CO (USA), 21-25 giugno 2022.
- 2017**: Joint ICTP-IAEA Workshop on *Fundamentals of Vitrification and Vitreous Materials for Nuclear Waste Immobilization* | (smr 3159) 6-10 novembre 2017.
- 2016**: CINECA school: “*Python for Scientific Computing*” – Modena (IT), 25-27 gennaio 2016
- 2015**: “*Winter School on the Physics of Indirect Excitons*” – Les Houches (FR), 16-20 marzo 2015

2014: CINECA school: *“Introduction to Parallel Computing with MPI and OpenMP”* – Casalecchio di Reno (IT), 9-11 dicembre 2014

2014: CINECA school: *“Introduction to HPC Scientific programming: Tools and Techniques”* – Casalecchio di Reno (IT), 3-5 novembre 2014

2014: *“International School on Physics of Indirect Excitons”*, “Ettore Majorana” Foundation and Centre for Scientific Culture – Erice (IT), 26 luglio – 1 agosto, 2014

2014: CINECA school: *“Introduction to the FERMI Blue Gene/Q, for users and developers”* – Casalecchio di Reno (IT), 17 marzo 2014

13. REVISORE PER PROGETTI DI SUPERCALCOLO

Revisore per progetti di supercalcolo ISCRA-LISA del CINECA; ambito: fisica computazionale della materia condensata.

14. REVISORE PER RIVISTE SCIENTIFICHE

Revisore per *“Proceedings of the National Academy of Sciences”* (PNAS, USA).

Revisore per *“Nature Communications”* (Springer-Nature, UK)

Revisore per *“Physical Review Materials”* (APS – American Physical Society)

Revisore per *“Physical Review B”* (APS – American Physical Society)

Revisore per *“Physical Review Letters”* (APS – American Physical Society)

Revisore per *“The Journal of Chemical Physics”* (AIP – American Institute of Physics).

Revisore per *“Journal of Physics Communications”* (IoP – Institute of Physics).

15. MEMBRO DI COMMISSIONI GIUDICATRICI

Since A.Y. 2025/2026: Member of the Council of PhD in Physics and NanoSciences, UNIMORE

2022: Membro della commissione giudicatrice della selezione pubblica per l'attribuzione di un assegno di ricerca a tema *“Implementazione di tecniche avanzate di calcolo ad alte prestazioni (HPC) e ad alto flusso (“high-throughput”, HTC) al software di simulazione quantistica Quantum ESPRESSO”* Area Fisica della SISSA, atto di nomina: Prot. n. 26875-III/13 N.817/2022.

2022: Membro della commissione giudicatrice della selezione pubblica per il conferimento di un assegno per lo svolgimento di attività di ricerca presso l'Area Fisica della SISSA, vertente su *“Proprietà topologiche e di trasporto di carica in conduttori ionici”* Area 02 – Scienze fisiche, settore concorsuale 02/B2 - (s.s.d. FIS/03), presso l'Area Fisica della SISSA, atto di nomina: Prot. n. 26874-III/13 N.816/2022.

2022: Membro della commissione giudicatrice della selezione pubblica per il conferimento di un assegno per lo svolgimento di attività di ricerca presso l'Area Fisica della SISSA, vertente su *“Proprietà di trasporto in liquidi e solidi disordinati”* Area 02 – Scienze fisiche, settore concorsuale 02/B2 - (s.s.d. FIS/03), presso l'Area Fisica della SISSA, atto di nomina: Prot. n. 26132-III/13 N.785/2022.

2020: Membro della commissione giudicatrice della selezione pubblica per l'attribuzione di una borsa di ricerca finalizzata allo svolgimento di nuove ricerche su *“High-performance computing on heterogeneous, modular, and scalable hardware architectures, based on GPU accelerators”* presso l'Area di Fisica della SISSA, atto di nomina: Prot. n. 5894-III/12 N. 190/2020.

2020: Membro della commissione giudicatrice della selezione pubblica per l'attribuzione di una borsa di ricerca post-laurea finalizzata allo svolgimento di nuove ricerche su *“Ab initio simulation of charge-transfer processes at the interface between metals and 2D overlayers”* presso l'Area di Fisica della SISSA, atto di nomina: Prot. n. 4830-III/12 N. 164/2020.

16. ATTIVITA' DIDATTICA

Febbraio-maggio 2026: 48 h “*Advanced Condensed Matter Theory*”, MSc in Physics, UNIMORE.

Settembre 2025 - maggio 2026: 40 h, “*Laboratory of machine learning and advanced computing for physics*”. MSc in Physics, UNIMORE.

Febbraio-giugno 2025: 48 h, “*Machine learning for scientific applications*”, MSc in Physics, UNIMORE

Settembre-dicembre 2024: 24 h, “*Solid State Physics*”, MSc in Physics, UNIMORE

Febbraio-marzo 2023: Corso PhD su “*Machine Learning Interatomic Potentials*”. School of Graduate Studies “Physics and Nanosciences”, Università di Modena e Reggio Emilia.

Aprile-maggio 2020, 2021, 2022: corso on-line destinato a studenti di dottorato provenienti da istituti internazionali, dal titolo “*Theory and numerical simulation of heat, mass and charge transport in condensed matter*” (assieme al Prof. Stefano Baroni, SISSA).

AA.AA. 2019/20, 2020/21: “Didattica Integrativa” per il corso di “*Fisica Statistica*” – CdL in Fisica – Dipartimento di Fisica, Università di Trieste.

A.A. 2018/19: “Attività Formativa Complementare” per il corso di “*Fisica Statistica*” – CdL in Fisica – Dipartimento di Fisica, Università di Trieste.

AA.AA. 2016/17, 2015/16, 2014/15, 2013/14: Esercitazioni per il corso di “*Termodinamica Statistica*” – CdL in Fisica – Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia.

17. ATTIVITA' DI SUPERVISIONE E TUTORAGGIO

Supervisor di Filippo Montorsi, PhD School in Physics and Nanosciences, UNIMORE. Tentative title: “Quantum effects on the transport properties of liquids and their uncertainty estimation”.

Co-supervisor di Luoxuan Peng, PhD School in Physics and Nanosciences, UNIMORE. Tentative title: “Machine learning for simulation in quantum materials discovery”

Relatore di Paolo Dugoni’s MSc Thesis in Physics, UNIMORE (defended on April 14th, 2026). Title: “Uncertainty quantification in symbolic regression for modelling ion diffusion in electrolytes”.

Correlatore Alessia Bortolazzi’s MSc Thesis, UNIMORE (defended on April 14th, 2026). Title: “Ab initio & Machine Learning Combined Study of the Lattice Thermal Conductivity of Boron Arsenide including Anharmonic Effects”.

Co-supervisore, insieme con il Prof. Stefano Baroni, della tesi di dottorato di ricerca di **Paolo Pegolo** presso la SISSA di Trieste. Tesi discussa il 05.01.2023, dal titolo: “*Charge and heat transport in ionic conductors*” <https://iris.sissa.it/handle/20.500.11767/130672>.

Tutoraggio nell’attività di dottorato di **Chiheb Ben Mahmoud** presso l’EPFL, supervisore Prof. Michele Ceriotti, in merito ad un progetto sull’inclusione delle eccitazioni elettroniche in potenziali machine learning. Tesi discussa il 20.03.2023, dal titolo “*Machine-learning the electronic density of states: electronic properties without quantum mechanics*” <https://infoscience.epfl.ch/record/301314>. Vedasi anche la pubblicazione: Ben Mahmoud, Grasselli, Ceriotti, [Phys. Rev. B., 106 \(12\), L121116](#) (Letter), 2022.

Tutoraggio nell’attività di dottorato di **Giulio Imbalzano** presso l’EPFL, supervisore Prof. Michele Ceriotti, in merito ad un progetto sulla stima dell’incertezza per modelli machine learning tramite *committee* e applicazioni al GaAs. Tesi discussa il 12.11.2021, dal titolo “*Transferable machine-learning models of complex materials: the case of GaAs*” <https://infoscience.epfl.ch/record/290022>. Vedasi anche la pubblicazione: Imbalzano *et al.*, [Journal of Chemical Physics, 154\(7\), 074102](#) (Editor’s pick), 2021.

18. COMPETENZE LINGUISTICHE

Italiano (madrelingua)

Inglese (C1)

Francese (C1)

19. COMPETENZE COMPUTAZIONALI

Vasta esperienza su simulazioni Car-Parrinello e calcoli di struttura elettronica tramite la teoria del funzionale della densità e sua versione perturbativa (DFT e DFPT), specificatamente tramite codici della suite di codici Quantum ESPRESSO.

Esperienza in simulazioni di dinamica molecolare classica e calcoli *nudged-elastic-band*, specialmente con i codici LAMMPS e i-PI.

Tecniche di machine learning (specialmente kernel ridge regression) finalizzate al fit di potenziali interatomici e alla predizione di proprietà vettoriali di materiali quali la densità degli stati elettronica.

Software per la visualizzazione e la gestione di strutture molecolari: VMD, xcrysden, VESTA, ASE.

Linguaggi di programmazione: Fortran, Python (particolarmente: Numpy, Scipy, Matplotlib, suite PyTorch per ML), Mathematica, Matlab, Bash (Unix Shell); fondamenti di C, Basic e Processing (per applicazioni Arduino).

Programmazione parallela: MPI, OpenMP.

Linguaggi di markup: LaTeX, HTML.

20. ATTIVITA' DI COMUNICAZIONE / OUTREACH

Da dicembre 2025: activities promoted as the Communication Coordinator of the Dept. of Physics, Informatics and Mathematics, UNIMORE.

Da giugno 2025: Admin of the webpage of the Theory and Simulations of Materials group, UNIMORE: <https://www.theomat.unimore.it/>.

20 maggio 2026: Outreach event "Research Shots", following the style of Pint of Science, at Binario 49 café (Reggio Emilia), in collaboration with the Dept. of Science and Methods of Engineering, UNIMORE.

Organization of Open Day of the Dept. of Physics, Informatics and Mathematics (February 2025 and 2026), with pedagogical activities to high-school students.

11 marzo 2026: Seminario presso Liceo Scientifico Statale Wiligelmo, Modena. "*In minimis maxima: Calcoli su scala atomica per predire l'evoluzione dei pianeti*".

European Researchers' Night 2025, Modena. Activity: "Matter of Matching: Un gioco di carte tra memoria e scienza dei materiali" see: <https://www.nottedellaricerca.unimore.it/2025/evento.html?e=112>

5 settembre 2024: Seminario (Training per le Olimpiadi della Fisica agli studenti di Emilia-Romagna e Marche) "*In minimis maxima: Calcoli su scala atomica per predire l'evoluzione dei pianeti*".

26 aprile 2024: Contributo orale (online) rivolto a giovani ricercatori intenzionati a scrivere un progetto di ricerca, Marie Skłodowska-Curie Action Info Day, Università SS Cirillo e Metodio, Macedonia del Nord.

Primavera-estate 2022 e 2023: Lezioni (in francese) su batterie a stato solido a studenti della scuola superiore "College Voltaire" di Ginevra, Svizzera.

Novembre 2021: Contributo in qualità di ricercatore all'iniziativa *Science is Wonderful!* (SiW), 2021 edition, Progetto finanziato dall'Unione Europea destinato a student delle scuole primarie e secondarie, all'interno della Azione Individuale Marie Skłodowska Curie Action.

Agosto 2020: Contributo sulla rivista inglese di divulgazione scientifica *All About Space* in merito alla struttura interna di Urano e Nettuno; titolo: "*What is the interior of an ice giant planet likely to be?*".

Agosto 2020: Partecipazione al programma radio RAI "Radar" e ad un web-radio podcast ("Co.Scienza") per parlare del trasporto di elettricità e calore in condizioni planetarie.

Settembre 2019: Collaborazione con SISSA e ICTP per l'evento di outreach "Trieste-Next".

Settembre 2019: Collaboration con SISSA per un progetto di "street science" con relativa performance eseguita durante la Notte Europea dei Ricercatori 2019.

6 marzo – 5 aprile 2017: Collaborazione occasionale per l'attività di gestione del progetto di comunicazione delle nanoscienze al grande pubblico "Into the Future" (CNR Nano e Fondazione Cassa di Risparmio di Modena), indirizzato a studenti delle scuole superiori della Provincia di Modena (Prot. CNR Nano n. 0000953, <https://intothefuture.fondazionedinmodena.it/>)

Febbraio-aprile 2017: Partecipazione al progetto "Into the Future", in qualità di CNR associate researcher (attività sull'esperimento della doppia fenditura per elettroni)

Dal 2014: Seminari e workshop di Fisica moderna indirizzati al grande pubblico alle scuole superiori

Dal 2012: Divulgazione all'interno del progetto "Inco.Scienza" (<https://www.inco-scienza.org/>)

A.A. 2011-12: Attività di divulgazione / outreach sulla "Fisica dei semiconduttori", con lezioni tenute al Civico Planetario "F. Martino" di Modena e presso il liceo scientifico "Ariosto-Spallanzani", Reggio Emilia.

21. PUBBLICAZIONI

1. M. A. Hernandez Bertran, D. Tisi, F. Grasselli, M. Ceriotti, E. Molinari & D. Prezzi, "Tracking the Lithiation State of Li_xSi from Machine-Learned XPS Binding Energies" arXiv preprint [arXiv:2602.23028](https://arxiv.org/abs/2602.23028) (2026).
2. S. Chong, T. Jiang, M. Domina, F. Bigi, F. Grasselli, J. Lee & M. Ceriotti, "Resolving the body-order paradox of machine learning interatomic potentials", *J. Chem. Phys.* **164**(6), 064121 (2026).
3. F. Grasselli, K. Rossi, S. de Gironcoli & A. Grisafi, "Long-range electrostatics in atomistic machine learning: a physical perspective". arXiv preprint [arXiv:2602.11071](https://arxiv.org/abs/2602.11071) (2026).
4. W. Zhou, B. Tang, Z. Fan, F. Grasselli, S. Baroni & B. Song, "Heat transport in superionic materials via machine-learned molecular dynamics", arXiv preprint [arXiv:2512.04718](https://arxiv.org/abs/2512.04718) (2025).
5. L. Benić, F. Grasselli, C. Ben Mahmoud, D. Novko & I. Lončarić, "Machine learning model for efficient nonthermal tuning of the charge density wave in monolayer NbSe_2 ", *Journal of chemical theory and computation*, **21**(16), 8130-8141 (2025).
6. P. Pegolo, E. Drigo, F. Grasselli & S. Baroni, "Transport coefficients from equilibrium molecular dynamics", *J. Chem. Phys.*, **162**(6), 064111 (2025).
7. F. Grasselli, S. Chong, V. Kapil, S. Bonfanti & K. Rossi, "Uncertainty in the era of machine learning for atomistic modeling", *Digital Discovery*, **4**(10), 2654-2675 (2025).
8. W.B. How, S. Chong, F. Grasselli, K. Huguenin-Dumittan & M. Ceriotti, "Adaptive energy reference for machine-learning models of the electronic density of states" *Phys. Rev. Materials*, **9**, 1, 013802 (2025).
9. S. Chong, F. Bigi, F. Grasselli, P. Loche, M. Kellner & M. Ceriotti, "Prediction rigidities for data-driven chemistry", *Faraday Discussions*, **256**, 322-344 (2025).
10. F. Bigi, S. Chong, M. Ceriotti & F. Grasselli, "A prediction rigidity formalism for low-cost uncertainties in trained neural networks", *Machine Learning: Science and Technology*, **5**(4), 045018 (2024).
11. D. Tisi, F. Grasselli, L. Gigli, and M. Ceriotti, "Thermal transport of Li_3PS_4 solid electrolytes with *ab initio* accuracy". Accepted in *Phys. Rev. Materials* (2024). [arXiv preprint arXiv:2401.12936](https://arxiv.org/abs/2401.12936).
12. P. Pegolo and F. Grasselli, "Thermal transport of glasses via machine learning driven simulations", *Front. Mater.* **11**:1369034 (2024).
13. L. Gigli, D. Tisi, F. Grasselli, and M. Ceriotti, "Mechanism of charge transport in lithium thiophosphate", *Chemistry of Materials* **36**, 3, 1482 (2024).
14. S. Chong, F. Grasselli, Ch. Ben Mahmoud, J. D. Morrow, V. L. Deringer, and M. Ceriotti, "Robustness of local predictions in atomistic machine learning models", *J. Chem. Theory Comput.*, **19**(22), 8020 (2023).
15. P. Pegolo, S. Baroni and F. Grasselli, "Self-interaction and transport of solvated electrons in molten salts", *J. Chem. Phys.* **159**, 094116 (2023).

16. A. Grisafi and F. Grasselli, "Effect of a temperature gradient on the screening properties of ionic fluids", [Phys. Rev. Materials 7, 045803](#) (2023).
17. Ch. Ben Mahmoud, F. Grasselli, M. Ceriotti, "Predicting hot-electron free energies from ground-state data", [Phys. Rev. B., 106 \(12\), L121116](#) (Letter, 2022).
18. P. Pegolo, S. Baroni, F. Grasselli, "Topology, Oxidation States, and Charge Transport in Ionic Conductors" [Annalen der Physik, 2200123](#) (2022) (Invited; on the cover page of the journal)
19. F. Grasselli, "Investigating finite-size effects in molecular dynamics simulations of ion diffusion, heat transport, and thermal motion in superionic materials" [J. Chem. Phys. 156, 134705](#) (2022)
20. P. Pegolo, S. Baroni and F. Grasselli, "Temperature- and vacancy-concentration-dependence of heat transport in Li_3ClO from multi-method numerical simulations", [npj Computational Materials 8, 24](#) (2022)
21. L. Stixrude, S. Baroni and F. Grasselli, "Thermal and Tidal Evolution of Uranus with a Growing, Frozen Core", [the Planetary Science Journal 2, 222](#) (2021)
22. F. Grasselli and S. Baroni, "Invariance principles in the theory and computation of transport coefficients", [Eur. Phys. J. B 94, 160](#) (2021) (invited)
23. G. Imbalzano, Y. Zhuang, V. Kapil, K. Rossi, E.A. Engel, F. Grasselli, and M. Ceriotti, "Uncertainty estimation for molecular dynamics and sampling", [Journal of Chemical Physics, 154\(7\), 074102](#) (Editor's pick, 2021)
24. P. Pegolo, F. Grasselli, and S. Baroni, "Oxidation States, Thouless' Pumps, and Nontrivial Ionic Transport in Nonstoichiometric Electrolytes", [Phys. Rev. X 10, 041031](#) (2020)
25. F. Grasselli, L. Stixrude, and S. Baroni, "Heat and charge transport in H_2O at ice-giant conditions from ab initio molecular dynamics simulations", [Nature Commun. 11, 3605](#) (2020)
26. F. Grasselli and S. Baroni, "Topological quantization and gauge invariance of charge transport in liquid insulators", [Nature Phys. 15, page 967](#) (2019)
27. R. Bertossa, F. Grasselli, L. Ercole, S. Baroni, "Theory and Numerical Simulation of Heat Transport in Multicomponent Systems", [Phys. Rev. Lett. 122, 255901](#) (2019)
28. S. Baroni, R. Bertossa, L. Ercole, F. Grasselli, A. Marcolongo, "Heat transport in insulators from ab initio Green-Kubo theory", Handbook of Materials Modeling. Applications: Current and Emerging Materials, edited by W. Andreoni and S. Yip, 2nd ed., [Chap. 12](#) (Springer, 2020), and arXiv:1802.08006v1 [cond-mat.stat-mech] (2018)
29. F. Grasselli, A. Bertoni, and G. Goldoni, "Classical and quantum dynamics of indirect excitons driven by surface acoustic waves", [Phys. Rev. B 98, 165407](#) (2018)
30. F. Grasselli, "Variational approach to the soft-Coulomb potential in low-dimensional quantum systems", [American Journal of Physics 85, p. 834](#) (2017)
31. F. Grasselli, A. Bertoni, G. Goldoni, "Exact long-wavelength plasmon dispersion on a ring with soft Coulomb interactions", [Physica Scripta 92, p. 095802](#) (Aug. 2017)
32. F. Grasselli, A. Bertoni, and G. Goldoni, "The role of internal dynamics in the coherent evolution of indirect excitons", Superlattices and Microstructures, special issue devoted to "[Indirect Excitons: Physics and Applications](#)" [108, p. 73](#) (2017) (invited)
33. T. Pincelli, F. Grasselli, V. N. Petrov, P. Torelli, and G. Rossi "Performance of photoelectron spin polarimeters with continuous and pulsed sources: from storage rings to free electron lasers", [Journal of Synchrotron Radiation 24, 175](#) (2017)
34. F. Grasselli, A. Bertoni, and G. Goldoni, "Time-dependent scattering of a composite particle: A local self-energy approach for internal excitations", [Phys. Rev. B 94, 125418](#) (2016)
35. F. Grasselli, A. Bertoni, and G. Goldoni, "Two-body quantum propagation in arbitrary potentials", [Journal of Physics: Conference Series, Vol. 738, p. 012028](#), Article for the Proceedings of the 5th International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE 2016)

36. F. Grasselli, A. Bertoni, G. Goldoni, “Exact two-body quantum dynamics of an electron-hole pair in semiconductor coupled quantum wells: A time-dependent approach”, [Phys. Rev. B 93, 195310](#) (2016)
37. F. Grasselli, A. Bertoni, and G. Goldoni, “Space- and time-dependent quantum dynamics of spatially indirect excitons in semiconductor heterostructures”, [J. Chem. Phys. 142, 034701](#) (2015).

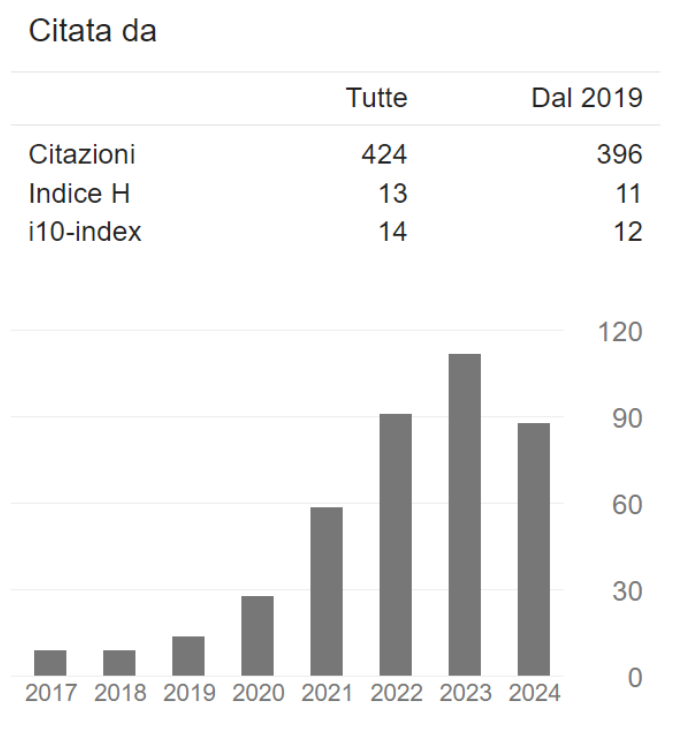
22. MONOGRAFIE E CAPITOLI SU VOLUME

S. Baroni, R. Bertossa, L. Ercole, F. Grasselli, A. Marcolongo, “Heat transport in insulators from *ab initio* Green-Kubo theory”, Handbook of Materials Modeling. Applications: Current and Emerging Materials, edited by W. Andreoni and S. Yip, 2nd ed., Chap. 12 (Springer), and arXiv:1802.08006v1 [cond-mat.stat-mech] (2018)

23. MANOSCRITTI IN CORSO DI REVISIONE

F. Bigi, S. Chong, M. Ceriotti, and F. Grasselli, “A prediction rigidity formalism for low-cost uncertainties in trained neural networks” [arXiv preprint arXiv:2403.02251](#) (2024).

24. INDICATORI BIBLIOMETRICI



25. ALTRI INTERESSI

Musicologia e musica antica, con un articolo pubblicato: F. Grasselli, “Ipotesi di ricostruzione degli automatismi del nuovo organo a Pratolino (1766)”, *Informazione Organistica (Rivista italiana di organologia)*, Vol. **32** (2012).

Performance musicali dal vivo con armonica e chitarra in vari festival italiani; baritono presso l’ensemble corale “Coro Monte Cusna” con partecipazione a concerti nonché premi e riconoscimenti in numerosi concorsi a livello nazionale.