

CURRICULUM SCIENTIFICO PROFESSIONALE

DOTT. LORENZO MONACELLI

PARTE I – INFORMAZIONI GENERALI

Nome e cognome	<i>LORENZO MONACELLI</i>
Data di nascita	
Luogo di nascita	
Cittadinanza	
Posizione accademica attualmente ricoperta	<i>Marie Curie Individual Fellowship (MSCA-IF) presso l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Svizzera</i>
Conoscenze linguistiche	<i>Italiano, Inglese</i>

INDICI BIBLIOMETRICI:

Indici bibliometrici secondo Web of Science:

Indice	Totale	Valide ASN (Solo pubblicazioni negli ultimi 5 anni)
Numero di pubblicazioni	25	24
Citazioni	671	649
Citazioni medie per pubblicazione	27.0	27.0
Indice di Hirsh (h – index)	12	12
Total impact factor	256.5	247.8
Average impact factor per research item	10.69	10.77

Parte II – TITOLI DI STUDIO ACCADEMICI

Tipologia di titolo e denominazione	Data di conseguimento	Istituzione e Stato	Valutazione finale	Titolo della tesi ed eventuali note
Laurea in Fisica	14-07-2016	Università Sapienza di Roma, Italia	110/110 cum laude	Dechipering the non-resonant response of impulsive vibrational spectroscopy. Percorso universitario premiato con attestato di eccellenza (top 5% degli studenti)
Dottorato in Fisica	07-02-2022	Università Sapienza di Roma, Italia	Ottimo	Unveiling the phase diagram of high-pressure hydrogen. Dottorato premiato con la menzione al merito Minerva (top 2% in tutta la macroarea A)

PARTE III – ALTRI TITOLI POSSEDUTI

III.1 - Attività didattica a livello universitario in Italia o all'estero:

Periodo di svolgimento	Istituzione e Stato	Breve descrizione dell'attività didattica svolta
dal 01-03-2017 al 1-10-2017	Università Sapienza di Roma, Italia	Esercitatore del corso di Elettromagnetismo per studenti della laurea triennale in Fisica. Incarico di insegnamento destinato a Dottorandi bandito dal dipartimento, per un totale di 40 ore tra didattica frontale e esami (scritto e orale).
dal 01-3-2022 Al 30-06-2022	École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Svizzera	Teaching assistant presso il corso di Atomistic and Quantum Simulations of Materials tenuto dal professor Nicola Marzari per studenti di Master e PhD in Material Science: 6 ore di didattica frontale; valutazione studenti per esame finale..
dal 01-3-2023 Al 30-06-2023	École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Svizzera	Teaching assistant presso il corso di Atomistic and Quantum Simulations of Materials tenuto dal professor Giovanni Pizzi per studenti di Master e PhD in Material Science: 6 ore di didattica frontale; valutazione studenti per esame finale.

III.2 - Documentata attività di formazione o di ricerca presso qualificati istituti italiani o stranieri:

Periodo di svolgimento	Istituzione e Stato	Breve descrizione dell'attività formativa/di ricerca svolta
dal 7/1/2020 al 31/1/2020 dal 28/5/2018 al 25/6/2018 dal 26/6/2017 al 24/7/2017	Donostia International Physics Center, San Sebastian, Spagna	Borsa di studio durante il dottorato. Programmazione e rilascio del codice open-source SSCHA (www.sscha.eu) nel gruppo del professor Ion Errea. Il rilascio del codice è stato accompagnato da un articolo [5] di cui sono primo autore con 66 citazioni a due anni dal rilascio.
dal 01-09-2019 al 31-12-2019	Istituto Italiano Tecnologia, Roma, Italia	Assegno di ricerca nel gruppo del professor Francesco Mauri. Svelare l'origine del melting di Charge-Density Wave nei dicalcogenuri metalli di transizione (TMD) 2D e 3D dovuta alle fluttuazioni quantistiche e termiche dei nuclei. L'attività (continuazione del dottorato) ha portato alla pubblicazione di 5 lavori sulle prestigiose riviste Nature Communication, Physical Review Letters, 2 Nanoletters, 2D materials [14,15,16,17,18]
dal 01-01-2020 al 31-12-2021	Università Sapienza di Roma, Italia	Contratto Post-Doc nel gruppo del professor Francesco Mauri. Studio della superconduttività ad alta pressioni in idrogeno e idruri e sviluppo del software SSCHA per la simulazione sulla termodinamiche delle fluttuazioni quantistiche nucleari. Il lavoro ha portato alla pubblicazioni di 5 lavori su prestigiose riviste: Nature, 2 Nature Physics (primo autore), Advanced Materials (IF 32), Journal of Physics, Condensed Matter, Physical Review B [1,2,3,5,8]. Il sottoscritto ha presentato i lavori al 20th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, su invito a Challenges in Designing Room Temperature Superconductors, SIF 105simo congresso nazionale.
dal 01-01-2022 al 31-12-2023	École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Svizzera	Marie Curie Individual Fellowship (MSCA-IF) nel gruppo del professor Nicola Marzari. Ricerca e simulazione di nuovi materiali tra le Metal Halide Perovskites per applicazioni fotovoltaiche e termoelettriche. Pubblicazione di un lavoro su Chemistry of Materials [4] (IF 11, due autori), presentato a conferenze Psi-K 2022, APS March meeting 2023 e su invito al 21st Interational workshop on computational physics and material science: Total energy and forces Methods.

III.5 - Organizzazione, direzione e coordinamento di gruppi di ricerca nazionali e internazionali, o partecipazione agli stessi:

Periodo di svolgimento	Programma di ricerca	Ruolo ricoperto e descrizione dell'attività
dal 01-10-2022 al 30-09-2023	EUROHPC Regular scale (Bando internazionale)	Co-PI , Project No. EHPC-REG-2022R03-090 awarded 25 million CPU/hours on the HPC LUMI-C after technical and scientific review. Project leader Prof. Matteo Calandra.
dal 01-10-2021 al 30-09-2022	PRACE Project Access Call 23 (Partnership for advanced computing in Europe). (Bando internazionale)	Co-PI , 1D-2D CDW CROSSOVER – Crossover in the mechanism determining CDW from 1 to 2 dimensions: The crucial role of Quantum Anharmonicity. Project leader Prof. Matteo Calandra, resources awarded 100 core hours on Joliot-Curie (AMD) hosted by GENCI at CEA, France
dal 1-10-2022 dal 31-09-2023	Production project, Centro di calcolo svizzero CSCS (Bando nazionale)	Principal Investigator , Simulazione High-Throughput sulle Metal Halide Perovskite per la ricerca di nuovi materiali ad alte performances fotovoltaiche. Progetto finanziato con 100000 node hours sulla partizione Hybrid HPC Cray XC50 di Piz Daint, dopo doppia revisione tecnica e scientifica.
dal 10-5-2019 al 10-10-2020	CINECA - ISCRA Class B project encoded as HP10B0CMS1 (Bando nazionale)	Principal Investigator - “High pressure hydrogen phase diagram”. Progetto finanziato con 100000 cpu hours sulla partizione M100 di MARCONI e 100000 cpu hours sulla partizione KNL dopo doppia revisione tecnica e scientifica .
dal 14-10-2020 al 14-10-2021	CINECA - ISCRA Class B project encoded as HP10B8C0C5 (Bando nazionale)	Principal Investigator – “High pressure metallization of hydrogen”. Progetto finanziato con 100000 cpu/hours sulla partizione M100 del supercomputer MARCONI dopo doppia revisione tecnica e scientifica
dal 1-05-2020 al 1-02-2021	CINECA – ISCRA Class C project encoded HP10CHFZM6 (Bando nazionale)	Principal Investigator - Hydrogen defects on Quartz. Progetto finanziato con 100000 cpu hours sul supercomputer GALILEO dopo revisione tecnica.
dal 7-2-2019 al 7-11-2019	CINECA – ISCRA Class C project encoded HP10CG8VD0 (Bando nazionale)	Principal Investigator - High symmetry structures of molecular hydrogen at Mbar pressures. Progetto finanziato con 100000 cpu hours sul supercomputer MARCONI KNL dopo revisione tecnica.
dal 11-04-2018 al 11-1-2019	CINECA – ISCRA Class C project encoded HP10C26W10 (Bando nazionale)	Principal Investigator - Study of the high-pressure hydrogen phase diagram: unveiling the secrets of the predicted room temperature superconductor Progetto finanziato con 100000 cpu hours sul supercomputer MARCONI KNL dopo revisione tecnica.

III.7 - Relatore a congressi e convegni nazionali e internazionali:

Giorno/i di svolgimento del congresso/convegno	Ente organizzatore e sede di svolgimento	Titolo del congresso/convegno	Titolo dell'intervento
Data/e 08-10/01/2020	Donostia International Physics Centre, San Sebastian, Spain	Workshop on Computational Physics and Materials Science: "Total Energy and Force Methods". Congresso internazionale.	Relazione su invito: Dynamical propagation of quantum nuclei in solids: from anharmonic Raman&IR to out of equilibrium phenomena. Applications to high-pressure hydrogen.
Data/e 26-29/07/2022	Gran Sasso Science Institute, l'Aquila, Italia	Challenges in Designing Room Temperature Superconductors, Workshop internazionale	Relazione su invito: Quantum Phase Diagram of High-Pressure Hydrogen
Data/e 14-18/01/2019	Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, in Trieste, Italy	Workshop on Crystal Structure Prediction: Exploring the Mendeleev Table as a Palette to Design New Materials. Conferenza internazionale	Relazione su invito: Self-consistent harmonic approximation: an efficient tool to evaluate the phase diagram with thermal and quantum nuclear fluctuations in crystals
Data/e 11-13/01/2023	Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, in Trieste, Italy	21st International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods	Relazione su invito: Thermodynamics and dynamical properties of strongly anharmonic and quantum materials
Data/e 23-27/09/2019	Gran Sasso Science Institute, l'Aquila, Italia, SOCIETA' ITALIANA DI FISICA	105° congresso nazionale della Società Italiana di Fisica.	Relazione su invito: The paramount role of quantum and thermal nuclear fluctuations in highpressure molecular hydrogen
Data/e 22-25/08/2022	SwissTech Convention Center on the EPFL campus, Psi-K	PSI-K 2022 CONFERENCE, congresso internazionale di fisica teorica della materia tenuto ogni 4 anni (1266 partecipanti).	Contributed talk: Stability of the black perovskite CsSnI ₃ : a route to eco-friendly solar cells
Data/e 23-25/02/2021	Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, in Trieste, Italy	20th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods	Contributed talk: Time-Dependent Self Consistent Harmonic Approximation: Anharmonic nuclear quantum dynamics and time correlation functions
Data/e 6-10/3/2023	Caesar's Forum, Las Vegas, USA	American Physical Society March Meeting, International converence	Contributed talk: Stability of the black perovskite CsSnI ₃ : a route to eco-friendly solar cells

III.8 - Premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca:

Data/anno di conseguimento	Titolo/denominazione del premio o riconoscimento	Ente/Istituzione conferente e Stato	Eventuali note
29/11/2021	Premio Minerva alla ricerca scientifica (III Edizione)	Fondazione Roma Sapienza	Menzione di merito: 1 premio e 1 menzione alla migliore tesi di dottorato interno alla macroarea A (scienze) svolte nei cicli di dottorato XXIX, XXX, XXXI e XXXII. La percentuale tra premi e menzioni corrisponde circa al top 2 % dei partecipanti.

III.10 – Eventuali ulteriori titoli posseduti:

Titolo	Data o periodo di svolgimento	Breve descrizione
1 – Abilitazione scientifica nazionale	05-06-2023	ASN conseguita nel settore FIS 03 – 02/B2, professore di seconda fascia
2 – Membro del Comitato organizzativo conferenza	25-29 Giugno 2023	Organizzatore della Summer School sulla SSCHA per simulazioni sulle proprietà termodinamiche dei materiali. Url: http://sscha.eu/Schools/2023/home/
3 – Co-relatore ufficiale tesi di laurea magistrale	Dal 01/02/2020 al 25/10/2020	Tesi magistrale di Antonio Siciliano dal titolo: Describing quantum phase transitions with rotational degrees of freedom. Università di Roma Sapienza, Valutazione finale 110/110 e lode
4 – Tutor della tesi di dottorato	Dal 01/10/2020 – in corso	Supervisione della attività scientifica durante la tesi di Dottorato di Giovanni Caldarelli, Università di Roma Sapienza.
5 – Tutor della tesi di dottorato	Dal 01/10/2020 – in corso	Supervisione della attività scientifica durante la tesi di Dottorato di Antonio Siciliano, Università di Roma Sapienza. Da questa attività è stato pubblicato un lavoro su rivista peer review[25].
6 – Tutor della tesi magistrale	Dal 02/2018 al 10/2018	Supervisione dell'attività di ricerca durante la tesi magistrale di Marco Cherubini. Università di Roma Sapienza, Valutazione finale 110/110 e lode, lavoro pubblicato su The Journal of Chemical Physics [24].
7 – Official co-supervisor of Master Semester project	Dal 01/08/2022 al 01/02/2023	Co-supervisore del progetto di ricerca semestrale dello studente Yongjoong Shin presso l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne dal titolo Study of the phase-diagram of CaSiO ₃ in the lower mantle of earth.
8 – Revisore per riviste scientifiche	Dal 2018 – in corso	Revisore scientifico presso riviste peer review: - 11 articoli su Physical Review B - 5 articoli su Physical Review Letters - 1 articolo su Physical Review X - 1 articolo su Physical Review Materials - 1 articolo su Physical Chemistry Chemical Physics - 1 articolo su Nature Communication Physics - 1 articolo su Applied Physics Letters
9 – Seminario Generale	Novembre 2020	Seminario generale all'università di Roma Sapienza dal titolo: Genome heterogeneity drives the evolution of species
10 – Seminario Generale	28/01/2020	Seminario generale nella serie MARVEL Junior Seminar dal titolo: Simulating quantum and anharmonic vibrational spectra at finite temperatures of solids and molecules
11- Presentazione di 3 posters a conferenze internazionali	- 01/2018 - 04/2018 - 01/2019	Presentazione poster alle conferenze: - International Workshop: Total Energy and Force Method 2018, Selwyn College, University of Cambridge - Conferenza internazionale Stochastic Models in Ecology and Evolutionary Biology. Istituto Veneto di Scienza, Lettere e Arti, Venezia, Italia - 19th International conference: Total Energy and Force

		Methods. International Center for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italia
12 – Ricerca indipendente in fisica dei sistemi complessi	2018-2021	Durante dottorato e post-doc, nel tempo libero, ho collaborato con il collega di laurea Mattia Miotto studiando le transizioni di fase in un modello di ecosistema su reticolo e la dinamica di evoluzione. Il lavoro è culminato con la pubblicazione di tre lavori, senza aiuto e contributo di alcun ricercatore senior, su Physical Review Research, Physical Review E ed Entropy . [9, 10, 11]

Parte IV – PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE DI CUI E' AUTORE/COAUTORE

N.	Tipologia	Autore/i	Titolo del prodotto	Titolo della rivista e riferimento	Anno	IF WoS
1 -	<i>Articolo su rivista</i>	I Errea, F Belli, L Monacelli , A Sanna, T Koretsune, T Tadano, F Bianco, M Calandra, R Arita, F Mauri, J A Flores-Livas	Quantum crystal structure in the 250-kelvin superconducting lanthanum hydride	Nature , 578. 66	2020	50.0
2 -	<i>Articolo su rivista</i>	L Monacelli , I Errea, M Calandra, F Mauri	Black metal hydrogen above 360 GPa driven by proton quantum fluctuations	Nature Physics 17 (1), 63-67	2021	19.7
3 -	<i>Articolo su rivista</i>	L Monacelli , M Casula, K Nakano, S Sorella, F Mauri,	Quantum phase diagram of high-pressure hydrogen	Nature Physics , In press	2023	19.7
4 -	<i>Articolo su rivista</i>	L Monacelli , N Marzari	First-Principles Thermodynamics of CsSnI3	Chemistry of Materials , 35, 4, 1702	2023	10.5
5 -	<i>Articolo su rivista</i>	L Monacelli , R Bianco, M Cherubini, M Calandra, I Errea, F Mauri	The stochastic self-consistent harmonic approximation: calculating vibrational properties of materials with full quantum and anharmonic effects	Journal of Physics: Condensed Matter , 33, 363001,	2021	2.7
6 -	<i>Articolo su rivista</i>	L Monacelli , I Errea, M Calandra, F Mauri,	Pressure and stress tensor of complex anharmonic crystals within the stochastic self-consistent harmonic approximation	Physical Review B 98 (2), 024106	2018	3.7
7 -	<i>Articolo su rivista</i>	L Monacelli , G Batignani, G Fumero, C Ferrante, S Mukamel, T Scopigno	Manipulating impulsive stimulated raman spectroscopy with a chirped probe pulse	The Journal of Physical Chemistry Letters 8 (5), 966-974	2017	8.7
8 -	<i>Articolo su rivista</i>	L Monacelli , F Mauri	Time-dependent self-consistent harmonic approximation: Anharmonic nuclear quantum dynamics and time correlation	Physical Review B , 103, 104305	2021	3.9

			functions			
9 -	<i>Articolo su rivista</i>	M Miotto, L Monacelli	Entropy evaluation sheds light on ecosystem complexity	Physical Review E , 98, 042402	2018	2.3
10	<i>Articolo su rivista</i>	M Miotto, L Monacelli	Genome heterogeneity drives the evolution of species	Physical Review Research , 2,043026	2020	Not available
11	<i>Articolo su rivista</i>	M Miotto, L Monacelli	TOLOMEO, a Novel Machine Learning Algorithm to Measure Information and Order in Correlated Networks and Predict Their State	Entropy , 23, 1138	2021	2.7
12	<i>Articolo su rivista</i>	I A Troyan, D V Semenok, A G Kvashnin, A V Sadakov, O A Sobolevskiy, V M Pudalov, A G Ivanova, V B Prakapenka, E Greenberg, A G Gavriiliuk, I S Lyubutin, V V Struzhkin, A Bergara, I Errea, R Bianco, M Calandra, F Mauri, L Monacelli , R Akashi, A R Oganov	Anomalous High-Temperature Superconductivity in YH6	Advanced Materials 33, 2006832,	2021	32.1
13	<i>Articolo su rivista</i>	U Aseginolaza, R Bianco, L Monacelli , L Paulatto, M Calandra, F Mauri, A Bergara, I Errea	Phonon collapse and second-order phase transition in thermoelectric SnSe	Physical review letters 122 (7), 0759	2019	8.3
14	<i>Articolo su rivista</i>	R Bianco, I Errea, L Monacelli , M Calandra, F Mauri	Quantum Enhancement of Charge Density Wave in NbS2 in the Two-Dimensional Limit	Nano letters 19 (5), 3098-3103	2019	11.2
15	<i>Articolo su rivista</i>	R Bianco, L Monacelli , M Calandra, F Mauri, I Errea	Weak Dimensionality Dependence and Dominant Role of Ionic Fluctuations in the Charge-Density-Wave Transition of NbSe2	Physical Review Letters , 125, 106101	2020	9.1
16	<i>Articolo su rivista</i>	J Diego, AH Said, S K Mahatha, R Bianco, L Monacelli , M Calandra, F Mauri, K Rosnagel, I Errea, S Blanco-Canosa	Van der Waals driven anharmonic melting of the 3D charge density wave in VSe2	Nature Communications 12, 598	2021	17.7
17	<i>Articolo su rivista</i>	J S Zhou, L Monacelli , R Bianco, I Errea, F Mauri, M Calandra	Anharmonicity and Doping Melt the Charge Density Wave in Single-Layer TiSe2	Nanoletters 20, 4809	2020	9.2
18	<i>Articolo su rivista</i>	J S Zhou, R Bianco, L Monacelli , I Errea, F Mauri, M Calandra	Theory of the thickness dependence of the charge density wave transition in 1T-TiTe2	2D Materials 7, 045032	2020	7.1

19	Articolo su rivista	A Pedrelli, P E Trevisanutto, L Monacelli , G Garberoglio, N M Pugno, S Taioli,	Understanding anharmonic effects on hydrogen desorption characteristics of Mg n H 2n nanoclusters by ab initio trained deep neural network	Nanoscale , 14, 5589	2022	8.3
20	Articolo su rivista	D Romanin, L Monacelli , R Bianco, I Errea, F Mauri, M Calandra	Dominant role of quantum anharmonicity in the stability and optical properties of infinite linear acetylenic carbon chains	The Journal of Physical Chemistry Letters , 12, 10339	2021	6.9
21	Articolo su rivista	L Ranalli, C Verdi, L Monacelli , G Kresse, M Calandra, C Franchini	Temperature-Dependent Anharmonic Phonons in Quantum Paraelectric KTaO3 by First Principles and Machine-Learned Force Fields	Advanced Quantum Technologies (Front cover), 6, 2370041	2023	5.3
22	Articolo su rivista	U Aseginolaza, R Bianco, L Monacelli , L Paulatto, M Calandra, F Mauri, A Bergara, I Errea	Strong anharmonicity and high thermoelectric efficiency in high-temperature SnS from first principles	Physical Review B , 100, 214307,	2019	3.6
23	Articolo su rivista	I J Onuorah, P Bonfa, R De Renzi, L Monacelli, F Mauri, M Calandra, I Errea	Quantum effects in muon spin spectroscopy within the stochastic self-consistent harmonic approximation	Physical Review Materials , 3, 073804	2019	3.3
24	Articolo su rivista	M Cherubini, L Monacelli , F Mauri	The microscopic origin of the anomalous isotopic properties of ice relies on the strong quantum anharmonic regime of atomic vibration	Journal of Chemical Physics , 155, 184502	2021	4.3
25	Articolo su rivista	A Siciliano, L Monacelli , G Caldarelli, F Mauri	Wigner Gaussian dynamics: simulating the anharmonic and quantum ionic motion	Physical Review B 107 (17), 174307	2023	3.9

Losanna, lì 24/06/2023

In fede
Lorenzo Monacelli