

Curriculum Vitae di Michele Ceotto

Indirizzo: Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano, via Golgi 19, 20133 Milano

Luogo di nascita: Conegliano (TV)

Telefono Ufficio: +39 02 503 14258 E-mail: michele.ceotto@unimi.it

Formazione Professionale

Presente-2006 **Ricercatore** presso il Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano

2005-2006 **Postdoctoral Fellow** presso il “Center for Biophysical Modelling and Simulation” diretto dal Prof. G.A. Voth, Dept. of Chemistry, University of Utah, Salt Lake City (USA)

2005-2000 **Ph.D. in Chimica**, University of California at Berkeley (USA); relatore Prof. W. H. Miller, titolo della tesi: “Semiclassical and Quantum Instanton approximations for thermal rate constants of chemical reactions”

2001 Qualifying Exam for the advancement of the Ph.D. candidacy (equivalente al “**Master in Science**”), University of California at Berkeley (USA)

2000-1999 **Laurea in Fisica** (110/110), Università degli Studi di Roma "La Sapienza"

2000 **TMR Researcher** presso il “Consejo Superior de las Investigaciones Cientificas” (CSIC) e l’“Istituto de Matematicas y Fisica Fundamental” (IMAFF), Madrid

1999-1991 **Laurea in Chimica** (110/110 e lode), presso l’Università degli Studi di Roma "La Sapienza"

Pubblicazioni

1. M. Ceotto, G. F. Tantardini, S. Atahan, A. Aspuru-Guzik, "First-principles implementation of semiclassical initial value representation molecular dynamics", *Multidimensional Quantum Mechanics with Trajectories*, Ed. D. Shalashilin and M. Miranda (CCP6, University of Leeds, 2008);
2. M. Ceotto, G. S. Ayton, G. A. Voth, "Accelerated Superposition State Molecular Dynamics for Condensed Phase Systems", *J. Chem. Theory Comput.* **4** 560 (2008);
3. M. Ceotto "Semiclassical and Quantum Instanton approximations for thermal rate constants of chemical reactions", **Ph.D. Dissertation Thesis** (337 pagine), edita da "University of California at Berkeley" (copyright © 2005 by Michele Ceotto);
4. M. Ceotto, S. Yang, W. H. Miller. "Quantum reaction rate from higher derivatives of the thermal flux-flux autocorrelation function at time zero" *J. Chem. Phys.* **122**, 044109 (2005);
5. M. Ceotto, W. H. Miller. "Test of the quantum instanton approximation for thermal rate constants for some collinear reactions" *J. Chem. Phys.* **120**, 14 (2004) 6356;
6. W. H. Miller, Y. Zhao, M. Ceotto, S. Yang. "Quantum instanton approximation for thermal rate constants of chemical reactions" *J. Chem. Phys.* **119**, 3 (2003) 1329;
7. M. Ceotto, A. García-Vela. "A reduced-dimensionality quantum model which incorporates the full-dimensional energy of the system. Application to the vibrational predissociation of Cl₂-Ne₂" *J. Chem. Phys.* **115**, 5 (2001) 2146;
8. M. Ceotto, F. A. Gianturco. "Internal coordinate couplings and symmetry properties: the search of a conical seam in the protonated oxygen" *J. Phys. Chem. A* **105**, 21 (2001) 5197;
9. M. Ceotto, F. A. Gianturco. "Gas-phase proton affinity of ozone: a computational test of the experimental mechanism" *J. Mol. Struct.-Theochem* **543**, 115 (2001);
10. M. Ceotto. "Effetti della fase di Berry nelle reazioni molecolari gassose" **Tesi di Laurea in Fisica** (luglio 2000);
11. M. Ceotto, F. A. Gianturco. "Charge-transfer effects in the gas-phase protonation of ozone: locating the conical intersections" *J. Chem. Phys.* **112**, 13 (2000) 5820;
12. M. Ceotto, F. A. Gianturco, D. M. Hirst. "Protonated ozone: structures, energetics and nonadiabatic effects" *J. Phys. Chem. A* **103**, 48 (1999) 9984;
13. M. Ceotto. "Protonazione dell'ozono in fase gassosa: energetica ed effetti di intersezioni coniche" **Tesi di Laurea in Chimica** (aprile 1999).

Collaborazioni scientifiche

- Prof. Alán Aspuru-Guzik, Harvard University (USA)
- Dr. Alexandra Viel, University of Rennes (France)
- Prof. Julio C. Arces, University of Colombia (Colombia)

Esperienze di insegnamento

presso l'Università degli Studi di Milano

| | |
|------------------|--|
| Semestre 2007 | Chimica Teorica (Modulo B) (docenza): corso di dinamica quantistica per la laurea magistrale in chimica |
| Semestri 2006-08 | Chimica Fisica I/ Laboratorio di Chimica Fisica I (codocenza): corso di termodinamica per la laurea triennale in chimica |
| Semestri 2006-07 | Chimica Fisica A/ Laboratorio di Chimica Fisica A (codocenza): corso di meccanica quantistica per la laurea triennale in chimica |
| Semestre 2006 | ciclo di lezioni per dottorandi in scienze chimiche: fondamenti della teoria dello stato di transizione |

presso l'University of California at Berkeley

| | |
|---------------|--|
| Semestre 2002 | Biofisica (CHEM130A, prof. A. Arkin): corso di termodinamica per laureandi in Biologia e Medicina |
| Semestre 2001 | Meccanica Quantistica (CHEM220A, prof. W. H. Miller): corso di principi di meccanica quantistica per studenti di dottorato in chimica fisica |
| Semestre 2000 | Principi di Chimica (CHEM1A, prof. A. Pines): corso introduttivo di chimica per studenti del primo anno di scienze |

Presentazioni a convegni e partecipazione a scuole

1. Settembre 2008, “Multidimensional quantum Mechanics with Trajectories” Leeds University (UK), intervento orale: “First-principles semiclassical molecular dynamics”, M. Ceotto, S. Atahan, G.F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik;
2. Agosto, 2008, “Quantum dynamical concepts: From path integrals to semiclassics”, Max-Planck-Inst. (Dresden): intervento orale: “Semiclassical initial value representation implementations”, M. Ceotto, S. Atahan, G.F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik;
3. Febbraio 2008, XXXVII Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Camogli (Italy), poster: “Infrared adsorption and power spectra of adsorbed molecules: Carbon monoxide molecules on Cu(100)”, M. Ceotto, D. Dell’Angelo, G.F. Tantardini;
4. Agosto 2007, American Chemical Society National 234th Meeting, Boston (USA), poster: “First Principles Semiclassical Molecular Power Spectra”, M. Ceotto, S. Atahan, G.F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik;
5. Maggio 2007, “Molecular Quantum Mechanics: New Models for New Experiments”, Accademia Nazionale dei Lincei, Roma, poster: “Power Spectra for adsorbed molecules”, M. Ceotto, G.F. Tantardini;
6. Luglio 2005, Quantum Reactive Scattering (QRS), Santa Cruz (USA); poster: “Quantum reaction rate from higher derivatives of the flux autocorrelation function”, M. Ceotto, S. Yang, W.H. Miller;
7. Gennaio 2005, “Mini Statistical Mechanics Meeting”, Berkeley (USA); poster: “Quantum reaction rate from higher derivatives of the thermal flux-flux autocorrelation function at time zero”, M. Ceotto, S. Yang, W.H. Miller;
8. Dicembre 2004, Dipartimento di Chimica dell’Università di Perugia (ospite del Professor V. Aquilanti), Italia; comunicazione orale: “How to calculate thermal rate constants for chemical reactions”, M. Ceotto;
9. Gennaio 2004, “Mini Statistical Mechanics Meeting”, Berkeley (USA); due posters: 1) “Quantum Transition State Theory”; 2) “Semiclassical Instanton Trajectories: the right corner-cutting”, M. Ceotto;
10. Luglio 2003, “XIX Dynamics Molecular Collisions Conference”, Lake Tahoe (USA), poster “Quantum Instanton Approximation for Thermal Rate Constants of Chemical Reactions”, M. Ceotto, W.H. Miller;
11. Giugno 2003, “Quantum Reactive Scattering” (QRS), El Escorial (Spagna): poster: “Quantum

- Instanton Approximation for Thermal Rate Constants of Chemical Reactions”, M. Ceotto, W.H. Miller;
12. Giugno 2003, “XVIII Molecular Energy Transfer Conference” (COMET), El Escorial (Spagna); poster: “Quantum Instanton Approximation for Thermal Rate Constants of Chemical Reactions”, M.Ceotto, W.H. Miller;
 13. Ottobre 2001, “Graduate Research Conferente” (GRC), Berkeley (USA); comunicazione orale: “How to Mimic Tunnelling from Asymptotic Conditions”, M. Ceotto, W.H. Miller;
 14. Agosto 2001, scuola estiva di Dinamica Quantistica dei Sistemi Molecolari “Charles Coulson”, Oxford (UK); poster: “Forward-Backward Semiclassical Initial Value Representation dynamics”, M. Ceotto, W. H. Miller;
 15. Marzo 2001, “Chemical Dynamics: a symposium in honor of Bill Miller on his 60th birthday”, Berkeley (USA); poster: “Electronically-induced Versus Symmetry-induced Conical Intersections”, M. Ceotto, F.A. Gianturco;
 16. Marzo 2000, Società di Chimica Fisica Spagnola presso il Consiglio Nazionale di Ricerca Spagnolo (CSIC), Madrid (Spagna); intervento orale: “Conical Intersections”, M. Ceotto;
 17. Luglio 1999, Bologna (Italia): incontro e discussione con il Prof. D. R. Yarkony riguardo le intersezioni coniche;
 18. Settembre 1999, Conferenza annuale della Sezione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana, Firenze (Italia); comunicazione orale: “Conical Intersections effects in the gas phase molecular protonation”, M. Ceotto, F.A. Gianturco;
 19. Giugno 1999, conferenza della Società Chimica Italiana “Strutture, Proprietà, Reattività e Dinamica”, Varenna (Italia): comunicazione orale: “Conical Intersections effects in the gas phase molecular protonation”, M. Ceotto and F.A. Gianturco;
 20. Agosto 1998, El Escorial (Spagna): Scuola Estiva “Trends on Chaos Theory”;
 21. Luglio 1998, conferenza ECAMP (European Conference on Atomic and Molecular Physics), Siena (Italia): poster “Intersezioni coniche nei sistemi molecolari”, M. Ceotto, F.A. Gianturco;
 22. Giugno 1998, Nijmegen (Olanda): “Second European Summer School on Trends in Molecular Physics”;
 23. Dicembre 1997, UCL London (UK): Conferenza annuale dei chimici teorici della “Royal Chemical Society”.

Conoscenza delle lingue

| | |
|-------------|---|
| Italiano: | madrelingua |
| Inglese: | scritto ed orale ottimo: TOEFL , CAE (Cambridge Advanced Certificate), TSE |
| Spagnolo: | scritto ed orale ottimo |
| Portoghese: | elementare. |

Conoscenze informatiche

| | |
|--------------------|--|
| Linguaggi: | Fortran 77 e Fortran 90, html |
| Packages: | MOLPRO, GAUSSIAN, VASP, VMD e simili |
| Sistemi Operativi: | Digital Unix, Linux, Windows, Mac OS X |

Borse di studio

| | |
|-----------|---|
| 2005-2006 | Center for Biophysical Modeling and Simulation dell'Università dello Utah, Salt Lake City (USA): contratto di consulenza e studio di postdottorato |
| 2000-2005 | University of California at Berkeley (USA): borsa di studio per studenti stranieri per il Ph.D. in Chimica Teorica |
| 2000-2001 | Borsa di studio all'estero del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) |
| 2000 | Unione Europea: borsa di studio "Training and Mobility for Researchers" (TMR) presso il C.S.I.C. (Consejo Superior de las Investigaciones Cientificas) di Madrid |
| 1998 | University of Warwick (Dept. of Chemistry), UK: borsa di studio di "visiting student" |
| 1991-1995 | I.D.I.S.U. (Istituto per il Diritto allo Studio Universitario): borsa di studio annuale per merito (media degli esami superiore al 28.5 tutti gli anni) |
| 1991-1995 | Università degli Studi di Roma "La Sapienza": esonero dal pagamento delle tasse universitarie per merito |
| 1990-1998 | Federazione Nazionale dei Cavalieri del Lavoro: borsa di studio per l'intera durata degli studi universitari (venti borse disponibili annualmente per tutto il territorio nazionale) comprendente vitto ed alloggio |

Referenti Accademici

Coordinatore Accademico

Relatore: G. F. Tantardini, Professore ordinario di Chimica (Chair)
Indirizzo: Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università degli Studi di Milano, via Golgi 19, 20133, Milano
Telefono: +39 02 50314269
e-mail: gianfranco.tantardini@unimi.it

Relatore della tesi di Ph.D.

Relatore: William H. Miller, Professor of Chemistry and Kenneth S. Pitzer Distinguished Professor
Indirizzo: 211 Gilman, Department of Chemistry and Kenneth S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry, University of California, Berkeley, California 94720, USA
Telefono: +1 510 642-0653
e-mail: miller@cchem.berkeley.edu

Presidente della Commissione d'esame per la candidatura al Ph.D.

Relatore: William A. Lester, Jr., Professor of Chemistry
Indirizzo: 212 Gilman, Department of Chemistry and Kenneth S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry, University of California, Berkeley, California 94720
Telefono: +1 510 643-9590, USA
e-mail: walester@lbl.gov

Postdoctoral Advisor

Relatore: Gregory A. Voth, Distinguished Professor of Chemistry
Indirizzo: Department of Chemistry and Center for Biophysical Modeling and Simulation, University of Utah, 315 S. 1400 E., Salt Lake City, Utah 84112-0850, USA
Telefono: +1 801 581-7272
e-mail: voth@chem.utah.edu

Metodi e temi di ricerca

La ricerca scientifica che sto sviluppando presso il dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica dell'Università di Milano ed in collaborazione con altri centri di ricerca internazionali è finalizzata allo sviluppo di teorie e codici per la simulazione di processi molecolari. Diversamente dagli approcci tradizionali dove si calcola la dinamica molecolare in modelli di potenziale dedotti da calcoli di struttura elettronica, sto elaborando un codice che permette il calcolo simultaneo del moto elettronico e di quello nucleare e che riproduce gli effetti quantistici in approssimazione semiclassica. Allo stato attuale, una dinamica molecolare di questo tipo rappresenta un esempio unico di dinamica quantistica perché permette di rimuovere gli inevitabili errori derivanti dallo sviluppo di una rappresentazione dell'energia potenziale. I risultati sinora ottenuti, volti a riprodurre gli spettri vibrazionali di molecole gassose, sono molto incoraggianti.

Allo stesso tempo, la mia ricerca scientifica si basa su metodi semiclassici e sulla teoria dello stato di transizione quantistica per studiare fenomeni molecolari che avvengono sulle superfici solide (nichel, rame e cristalli di cloruro di sodio). I miei calcoli riguardano la determinazione della costante di diffusione dell'atomo di idrogeno e l'interazione del monossido di carbonio con queste superfici.

Nella mia precedente attività di ricerca mi sono dedicato allo studio delle reazioni chimiche mediante simulazioni all'elaboratore. Nella tesi di laurea in Chimica ho calcolato le superfici di energia potenziale su cui avvengono le reazioni ed in particolare quelle di trasferimento di carica da molecola a protone; nei riferimenti 8-13 della lista delle pubblicazioni è analizzato il caso dell'ossigeno e dell'ozono. Questo studio è stato ulteriormente approfondito nella tesi di laurea in Fisica con particolare riferimento alla teoria delle intersezioni coniche, alle fasi geometriche o di Berry ed in generale alle proprietà topologiche delle superfici di energia potenziale (rif. 10). In entrambi le tesi sono stati usati packages di calcolo *ab initio* e sono stati confrontati diversi livelli di calcolo per comprendere l'effetto che ha il trasferimento di carica sugli orbitali molecolari.

In un periodo successivo, trascorso presso il maggior centro statale di ricerca spagnolo (C.S.I.C.), mi sono occupato della dinamica di dissociazione di clusters di neon e cloro con metodi quantistici esatti quali il "Time Dependent Self Consistent Field" (rif. 7) e delle probabilità di dissociazione di queste molecole metastabili.

Successivamente, nella tesi di dottorato (rif. 3) ho ulteriormente ampliato le mie conoscenze di dinamica molecolare applicando e sviluppando diversi metodi. Avendo come principale obiettivo il calcolo delle

costanti delle reazioni chimiche e sviluppando teorie analitiche nel formalismo meccanico statistico delle funzioni di correlazione di flusso, ho scritto codici sia per metodi approssimati che fanno uso di traiettorie classiche e approssimazioni semiclassiche, che per metodi esatti, come il “*Discrete Variable Representation*” (DVR) in base di Fourier. Di queste teorie la più recente ed accurata che sia stata sviluppata nel gruppo del Prof. W. H. Miller è sicuramente quella dell’approssimazione di instantone (rif. 4-6). Pur facendo parte della famiglia delle “Teorie dello Stato di Transizione”, questa teoria include effetti quantistici senza dover ricorrere a correzioni *ad hoc*. Nel perseguire ulteriori implementazioni della suddetta teoria, ho inoltre imparato ad usare il formalismo degli integrali di cammino di Feynmann. A tal fine ho impiegato metodi numerici di tipo Monte Carlo (nella variante METROPOLIS) ed ho appreso le più recenti tecniche numeriche e computazionali di accelerazione di questo metodo.

Durante la fruizione di una borsa di studio di post-dottorato, mi sono dedicato allo studio di metodi di accelerazione della dinamica classica con tecniche di “importance sampling”.

Nel complesso la mia esperienza scientifica mi permette di spaziare nel campo della dinamica molecolare conoscendo come generare ed interpretare le superfici di energia potenziale, come sviluppare nuove teorie analitiche per il calcolo delle osservabili fisiche con metodi classici, semiclassici e quantistici, e come implementarle usando un nutrito bagaglio di tecniche numeriche aggiornate.

Milano, 2008

Michele Ceotto