

CURRICULUM PROF. GIOVANNA FRONZONI

Professore ordinario di Chimica Fisica

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste

Formazione e carriera accademica

1982 : Laurea in Chimica , Università di Trieste, 110/110 e Lode

Ottobre 1983- ottobre 1986: borsa di studio per il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (settore Chimica Teorica e Strutturale) nell'ambito del Consorzio Universitario Ferrara - Venezia – Trieste. Discussione della tesi: Roma - ottobre 1987 con conseguente ottenimento del Diploma di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche.

1987-1988 : attività di ricerca presso il gruppo di Chimica Teorica del Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Trieste. Nell'a.a. 1987/88 è docente dell'insegnamento di "Chimica Fisica" come professore a contratto del Corso di Laurea in Scienze delle Preparazioni Alimentari (Facoltà di Agraria) dell'Università di Udine.

- 1989 : Borsa di studio del centro di calcolo CINECA di Bologna per svolgere il progetto :
” Sviluppo ed installazione di una libreria di programmi per la chimica computazionale”

- 1990 : Premio Accademico per le Scienze Chimiche per l'anno 1989, dell'Accademia di Scienze Fisiche e Matematiche di Napoli.

1990-1998 : Ricercatore di Chimica Fisica presso il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Trieste.

1998 - 2019 : Professore Associato nel settore CHIM/02 (Chimica Fisica) presso il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Trieste.

2020 : Professore Ordinario nel settore CHIM/02 (Chimica Fisica) presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste.

Attività accademica

- Delegato per la didattica del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche , Università di Trieste, da settembre 2015 a gennaio 2022
- Membro del Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana da febbraio 2020 ad oggi
- Membro della Giunta del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche , Università di Trieste, da ottobre 2018 ad oggi
- Membro del panel di valutatori CVR (Commissione per la valutazione della Ricerca) dell'Università di Trieste per l'area chimica dal 2018 al 2021
- Membro del Comitato Scientifico del Collegio Universitario di Merito “Luciano Fonda”, Università di Trieste, da giugno 2016 a maggio 2022
- Direttore vicario del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche , Università di Trieste da Settembre 2012 ad agosto 2015.

- Membro del Collegio dei docenti del Dottorato in Nanotecnologie, Università di Trieste, periodo 2011-2016
- Membro della Commissione di Ateneo per l'attivazione di assegni di ricerca in cofinanziamento MIUR anno 2013 (nel 2015)
- Membro della Giunta del Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Trieste, da Novembre 2008 a Dicembre 2010
- Membro del Collegio dei docenti del Dottorato in Chimica, Università di Trieste, periodo 2000-2006.
- Ha partecipato a numerose commissioni per la stesura dell'ordinamento didattico del corso di laurea in Scienze Ambientali (Facoltà di Scienze MFN dell'Università di Trieste) e ha fatto parte della commissione didattica del corso di laurea in Scienze Ambientali (periodo 2000 - 2008).

Attività di ricerca

ORCID: 0000-0002-5722-2355

ResearchID: C-4497-2017

La problematica più generale dell'attività di ricerca della Prof. G. Fronzoni riguarda lo sviluppo e l'applicazione di approcci quanto-chimici per la descrizione di processi di fotoassorbimento e fotoionizzazione in sistemi di varia dimensionalità.

L'attività di ricerca si è sviluppata lungo le seguenti linee principali (in ordine temporale):

1) Studio degli stati elettronici discreti nei processi di fotoionizzazione e fotoassorbimento con metodi ab-initio di tipo CI (Configuration Interaction)

Questa tematica di ricerca è stata affrontata a partire dalla fine del dottorato di ricerca (che è stato essenzialmente dedicato al calcolo di osservabili magnetiche) ed ha avuto come obiettivo primario la messa a punto di schemi di calcolo ab-initio, basati su tecniche di Interazione di Configurazione (CI), per lo studio degli stati discreti nei processi di fotoionizzazione e fotoassorbimento di molecole piccole e di medie dimensioni.

2) Studio degli stati elettronici del continuo e calcolo delle variabili dinamiche della fotoionizzazione molecolare con formalismi DFT e TDDFT

La descrizione teorica degli stati elettronici del continuo coinvolti nei processi di fotoionizzazione molecolare è un problema complesso e non standard che ha stimolato lo sviluppo, all'interno del gruppo di chimica teorica del dipartimento di Chimica di UniTS, di un metodo teorico basato sulla Teoria del Funzionale Densità (DFT), utilizzando un set di base molto accurato costituito da funzioni di tipo B-spline. Tale metodo è stato successivamente esteso ad una versione Time Dependent (TDDFT). È stato possibile calcolare i parametri di fotoemissione di molte molecole libere di media dimensionalità per il confronto e la razionalizzazione degli esperimenti.

3) Studio di processi di fotoassorbimento nelle regioni di core e di valenza di sistemi estesi con approcci DFT e TDDFT

Questa attività di ricerca rappresenta il principale ed attuale interesse scientifico della Prof. Fronzoni. Inizialmente è stato proposto ed implementato (nel codice ADF) un approccio ispirato alla cosiddetta “core-valence separation approximation” per il calcolo delle eccitazioni elettroniche di core con il metodo TDDFT. Lo schema è stato esteso all’inclusione degli effetti spin-orbita (SO) per lo studio delle eccitazioni da livelli di core 2p. Sono stati studiati numerosi sistemi molecolari, tra cui diversi composti di metalli di transizione. Per la descrizione delle spettri delle soglie K è stato messo a punto lo schema Transition Potential DFT che può essere applicato anche a sistemi estesi. La gran parte dei lavori relativi al calcolo e all’interpretazione degli spettri NEXAFS di molecole libere è condotta in collaborazione con il gruppo sperimentale della beamline GAPH (GAS-PHASE PHotoemission) del Sincrotrone Elettra. Lo studio spettroscopico di molecole adsorbite su superfici è condotta invece in collaborazione con il gruppo sperimentale della beamline ALOISA (Advanced Line for Overlay, Interface and Surface Analysis) del Sincrotrone Elettra.

Per quanto riguarda il fotoassorbimento da shell di valenza, la problematica più generale riguarda la descrizione delle eccitazioni di valenza in grandi cluster metallici, in particolare per approfondire la natura delle transizioni cosiddette plasmoniche che emergono quando i sistemi raggiungono dimensioni nanometriche. Gli studi riguardano in particolare cluster metallici di Au ed Ag. E’ stato sviluppato un nuovo algoritmo TDDFT, basato sul calcolo della polarizzabilità dinamica complessa, per studiare i cluster metallici più grandi.

I risultati ottenuti dall'attività di ricerca della Prof. Fronzoni sono stati raccolti finora in 139 pubblicazioni ISI su riviste internazionali con referee (h-index= 29; fonte SCOPUS) e presentati in numerosi congressi nazionali ed internazionali.

La Prof. Fronzoni svolge attività di reviewer per diverse riviste scientifiche internazionali (J. Chem. Phys., J. Phys. Chem., PhysChemChemPhys, New J. Chem., Chem. Phys. Letters).

Collaborazioni scientifiche

Nazionali:

- Dott. M. de Simone (CNR-IOM) e Dott. M. Coreno (CNR-ISM), GAPH beamline (GAS-PHASE PHotoemission) di Elettra per lo studio spettroscopico di molecole in fase gassosa ;
- Dott. C. Grazioli (CNR-IOM) e collaboratori, ALOISA beamline (Advanced Line for Overlay, Interface and Surface Analysis) per lo studio di molecole adsorbite su superfici.).
- Prof. Vincenzo Barone (Scuola Normale Superiore – Pisa) : calcolo degli spettri NEXAFS e XPS vibrazionalmente risolti di molecole in gas-phase
- Dott. A. Guarnaccio (CNR, Istituto di Struttura della materia, Potenza) : studio spettroscopico di oligomeri coniugati basati su tiofene
- Prof. M. Casarin (Università di Padova) : simulazioni DFT e TDDFT di spettri core excited
- Dott. Alessandro Fortunelli (CNR-IPCF Pisa): proprietà ottiche di cluster metallici

Internazionali :

- Prof. Yi Luo (Theoretical Chemistry, Department of Biotechnology Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden) on metal L-edges XANES and vibronic coupling in NEXAFS spectra.
- Prof. Dean Cvetko (University of Ljubljana) on theoretical and experimental studies on organic/inorganic frameworks
- Prof. Hande Üstünel (Middle East Technical University, Ankara) on theoretical modeling of surface-molecule interaction
- Prof. Carla Puglia (Uppsala University) on spectroscopic characterizations of building block molecules isolated and adsorbed on surfaces
- Prof. Witte, Philipps-University Marburg on theoretical and experimental spectroscopic characterization of titanyl-phthalocyanine (TiOPc) films on Ag(111)

Finanziamenti per la ricerca (progetti di ricerca piu' recenti)

- Progetto PNRR HPC - National Centre for HPC, Big Data and Quantum Computing (Spoke 7) (2022-2025) - **partecipante**
- Progetto FRA 2016 dell'Università di Trieste "Sintesi e caratterizzazione con luce di sincrotrone di sistemi molecolari complessi" - **coordinatore**
- PRIN 2010-11 "DESCARTES - Development of Energy-targeted Selfassembled supramolecular systems: a Convergent Approach through Resonant information Transfer between Experiments and Simulations" 2013-2016 – **coordinatore locale**
- PRIN 2008 "MODELLI TEORICI E STUDI COMPUTAZIONALI DI OSSERVABILI SPETTROSCOPICHE DI SISTEMI CONDENSATI " 2010-2012 – **coordinatore locale**
- PRIN 2006 "Metodi computazionali per lo studio di proprietà strutturali e dinamiche di nanoparticelle in sospensioni colloidali " 2007-2009 - **partecipante**
- PRIN 2004 "MODELLI TEORICI E ALGORITMI COMPUTAZIONALI PER LE OSSERVABILI SPETTROSCOPICHE E LE PROPRIETA' DI RISPOSTA MOLECOLARE " 2005-2007 - **partecipante**
- PRISMA INSTM 2004 "Studio dei fenomeni di fotoassorbimento di core e di valenza in materiali cristallini e nanostrutturati", 2004, **partecipante**
- FIRB AUTONOMI LIBERI (progetto RBAU01HHBL) "Implementazione di nuovi algoritmi per la descrizione dei fenomeni di fotoionizzazione e scattering di elettroni e positroni in molecole di grandi dimensioni", 2003-2005 , **partecipante**
- **coordinatore** di due progetti ISCRA C for computational resources at CINECA, (2012 e 2013)
- **partecipante** a tre progetti ISCRA C for computational resources at CINECA (2014 ,2015 e 2017)

Attività didattica

Negli anni più recenti la Prof. Fronzoni è stata docente dei seguenti insegnamenti:

- Chimica Fisica III (corso fondamentale della LT in Chimica, 7 cfu) (contenuti: spettroscopia molecolare)
- Chimica Fisica (corso fondamentale per il corso di laurea a ciclo unico in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, 8 cfu) (contenuti: termodinamica e cinetica chimica)
- Chimica Fisica dei solidi (corso fondamentale della LM in Chimica, curriculum “Sistemi nanostrutturati e supramolecolari”, 4 cfu e poi 3 cfu) (contenuti: struttura elettronica dei solidi)

Le valutazioni degli studenti sono sempre risultate positive e sono state rese pubbliche

<https://valmon.disia.unifi.it/sisvaldidat/units/index.php>);

<https://sisvaldidat.it/AT-UNITS/AA-2021/T-0/S-29000/Z-1/CDL-268/C-GEN/I-104SM2YXLEZ/BERSAGLIO>

<https://sisvaldidat.it/AT-UNITS/AA-2021/T-0/S-29000/Z-1/CDL-35/C-GEN/I-011FA/BERSAGLIO>

Nell’ambito del Dottorato di ricerca, la Prof. Fronzoni ha tenuto per alcuni anni (2003-2006) il corso di “SPETTROSCOPIE ELETTRONICHE” (Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche e Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie Chimiche e Farmaceutiche).

E’ stata presidente della commissione per l’ ammissione alla Scuola di Dottorato di Ricerca in Nanotecnologie dell’Università di Trieste (nel 2011) e membro della commissione per l’ ammissione al Corso di Dottorato di Ricerca in Chimica dell’Università di Trieste (nel 2017).