

## INFORMAZIONI PERSONALI



## Leonardo Guidoni

Department of Physical and Chemical Sciences, University of L'Aquila

## ESPERIENZA LAVORATIVA

Gen 2021 Professore Ordinario in Chimica Fisica all'Università dell'Aquila  
 Dic 2008-2020 Professore Associato in Chimica all'Università dell'Aquila  
 Gen 2007 Abilitazione di Professore Universitario in Francia ("Qualification au Professeur des universités")  
 Ago-Set 2006 Professore Invitato all'Università di Leiden, Paesi Bassi.  
 Ago-Set 2005 Professore Invitato al Politecnico Federale Svizzero di Losanna, Svizzera.  
 2004-2008 Professore a Contratto "Rientro Cervelli" in Biochimica e Biofisica Computazionale presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma La Sapienza.  
 Lug 2002 Borsa post-dottorato al Politecnico Federale Svizzero di Losanna, Istituto di Chimica molecolare e Biologia, gruppo della Prof. U. Röthlisberger.  
 Nov 2000 Borsa post-dottorato al Politecnico Federale Svizzero di Zurigo (ETH), Dipartimento di Chimica Inorganica, gruppo della Prof. U. Röthlisberger.

## ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Oct 2000 PhD degree *cum laude* in Theory of Condensed Matter at the International School for Advanced Studies of Trieste.  
 Jul 1996 Degree in Physics at Università degli Studi di Roma "La Sapienza" with first class honors (mark 110/110 *cum laude*).

## CAPACITA' E COMPETENZE PERSONALI

Madrelingua Italiano

Altre lingue English (fluent)

Programmazione Fortran90, Python, Lua, Linux

## ATTIVITA' DIDATTICA

Corsi universitari Elenco dei corsi svolti  
 Corso di "Chimica Fisica 2" per la Laurea Triennale in Chimica e Materiali all'Università dell'Aquila  
 Corso di "Chimica Generale" per Laurea Triennale in Biotecnologie all'Università dell'Aquila.  
 Corso di "Chimica Generale" per Laurea Triennale in Ingegneria Industriale all'Università dell'Aquila.  
 Corso di "Chimica Teorica" e "Computer Modelling and Simulations of Biomolecules" per la Laurea Magistrale in Chimica e Materiali  
 Corso di "Computer Modelling and Simulations of Biomolecules" per la Laurea Magistrale in Chimica e Materiali e per la Laurea Magistrale in Ingegneria Matematica all'Università dell'Aquila.  
 Corso di "Computer Modelling and Simulations of Biological Systems" e "Principles of Structural and Cell Biochemistry" per la Laurea Magistrale in Ingegneria Matematica all'Università dell'Aquila.  
 Corso di "Introduction to Quantum Computing" per il Dottorato in Matematica e Modelli e per Dottorato in Fisica e Chimica all'Università dell'Aquila.

Corso di "Simulazione atomistica" Per la Laurea Magistrale in Fisica all'Università di Roma La Sapienza.

## PUBBLICAZIONI

La sua produzione scientifica è pubblicata attraverso più di 100 lavori su riviste internazionali di Chimica, Fisica e Biochimica. Le sue pubblicazioni scientifiche hanno raccolto ad oggi più di 3100 citazioni.

Selezione delle pubblicazioni scientifiche:

- Wave function adapted Hamiltonians for Quantum Computing Ratini, L., Capecci, C., Benfenati, and Guidoni, L., Journal of Chemical Theory and Computation, doi.org/10.1021/acs.jctc.1c01170, 2022.
- Dynamics of the Special Pair of Chlorophylls of Photosystem II Narzi, D., Bovi, D., De Gaetano, P., Guidoni, L., Journal of the American Chemical Society, 138 (1), pp. 257-264., 2016.
- Atomistic Texture of Amorphous Manganese Oxides for Electrochemical Water Splitting Revealed by Ab Initio Calculations Combined with X-ray Spectroscopy. Giuseppe Mattioli, Ivelina Zaharieva, Holger Dau, and Leonardo Guidoni. J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 32, 10254-10267
- Pathway for Mn-cluster oxidation by tyrosine-Z in the S2 state of photosystem II. Narzi, D., Bovi, D., Guidoni, L., Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 111 (24), 2014.
- Reaction pathways for oxygen evolution promoted by cobalt catalyst Mattioli, G., Giannozzi, P., Amore Bonapasta, A., Guidoni, L., Journal of the American Chemical Society, 135 (41), pp. 15353-15363, 2013.

## ATTIVITA' DI RELATORE E SUPERVISORE

LG è stato relatore e supervisore di tesi Triennali, Magistrali e di Dottorato in Chimica, Biochimica, Fisica, Biofisica, Scienze dei Materiali ed Ingegneria Matematica in diversi curricula all'Università dell'Aquila, all'Università di Roma La Sapienza ed all'Università di Roma3. Di seguito l'elenco degli studenti.

Alle tesi di dottorato sono state svolte nell'ambito di diversi settori disciplinari di Chimica e di Fisica: CHIM/02, CHIM/07, FIS/03.

Studenti di Dottorato: Mario Frezzini, Leonardo Ratini, Chiara Capecci, Cintia Scafa Urbaez Vilchez, Mario Frezzini, Daniele Ottaviani, Fabio Pitari, Matteo Capone, Giovanna Rogati, Francesco Cappelluti, Aliya Tichengulova, Barbara Gregori, Godfred Epie Essongolle, Daniele Bovi, Matteo Barborini, Gaia Di Paolo, Maria Montagna.

Studenti di Laurea Magistrale: Chiara Capecci, Yahya Saleh, Mario Frezzini, Eduard Elias, Fabio Pitari, Marco Alfieri, Barbara Gregori, Daniele Bovi, Henry Martin, Diego Di Girolamo, Andrea Di Luca, Pietro De Gaetano, Luana Tanzi, Chiara Pasquini, Caterina De Franco, Marco Manzoli, Ganesh Sivaraman, Kwame Atta Gyamfi, Eleonora Amici, Miriam Garcia-Soto, Marco Magliocchetti, Delyan Zelyazov, Olga Chernomor, Magdalena Szczechna, Gaia Di Paolo, Maria Montagna, Alessandro Lovato.

Studenti di Laurea Triennale: Chiara Capecci, Luca D'Alessandro, Davide Sabeddu, Silvia Menghi, Mohammad Nurul Islam, Paola Malacari, Michela Ronti, Jared Lolli, Marco Alfieri, Fabio De Vellis.

Post-docs: Daniele Narzi, Daniele Varsano, Emanuele Coccia, Andrea Zen, Daniele Bovi, Francesco Benfenati, Shin Nakamura, Chao Zhang, Antonio Di Martino, Andrea Zen, Fabio Sterpone.

Borsisti: Matteo Capone, Cintia Scafa Urbaez Vilchez, Andrea Di Stefano, Miriam Garcia Soto.

LG ha anche svolto il ruolo di controrelatore o valutatore in diverse commissioni di dottorato per le seguenti Università: Università di Helsinki, SISSA-Trieste, Politecnico Federale Svizzero di Zurigo, Università di Roma La Sapienza, Università di Parigi VI.

## ORGANIZZAZIONE E RESPONSABILITA'

Nell'Aprile 2007 LG ha organizzato come organizzatore principale e locale il Workshop "Progress in ab initio modeling of biomolecules: towards computational spectroscopy" che si è tenuto a Roma con più di 100 partecipanti.

A Settembre 2010 LG ha co-organizzato il Simposio "Ab-Initio Methods on Biological Systems" alla conferenza "Psi-k2010" a Berlino, Germania.

A Febbraio 2011 LG ha organizzato una Scuola di dottorato nazionale su "Dinamica molecolare da principi primi" presso il Dipartimento di Fisica della Sapienza, Università di Roma.

A Giugno 2013 LG ha co-organizzato una scuola internazionale di dottorato di 5 giorni su "Ab initio Molecular Dynamics for Biomolecules" a S. Stefano di Sessanio presso L'Aquila.

Nel Maggio 2015 LG ha co-organizzato un workshop di 3 giorni sul tema "Computer simulations for condensed phase systems" al CNR di Roma.

Nel 2017 LG ha co-organizzato un workshop di 3 giorni dal titolo "BUUR Workshop on Natural and Artificial Photosynthesis" presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma La Sapienza.

A Dicembre 2018 LG ha co-organizzato un workshop su "Quantum Computing and High Performance Computing" al CINECA di Bologna.

Dal 2008 al 2017 LG è stato membro del Comitato Direttivo del programma Network della European Science Foundation sulla struttura elettronica intitolato "Advanced Concepts in ab-initio Simulations of Materials Psi-k2".

Nel 2015 LG è stato membro della Commissione Ricerca del Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche dell'Università dell'Aquila.

Dal 2019 LG è membro della Commissione Ricerca del Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche dell'Università dell'Aquila.

Nel 2019 LG è stato membro delegato del Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche per la Commissione organizzatrice della notte dei ricercatori 2019.

#### ATTIVITA' DI DIVULGAZIONE SCIENTIFICA

---

Leonardo Guidoni ha tenuto alcune conferenze a carattere divulgativo indirizzate sia agli studenti dei primi anni dell'Università che agli studenti della scuola media di primo e secondo grado. Nel 2012 partecipato a Frascati Scienza come relatore in un "Caffè con la scienza". Nel 2017 è stato relatore ad un seminario divulgativo sul tema della Fotosintesi alla mostra florovivaistica "FloraCult 2017". Dal 2019 organizza attività laboratoriali divulgative per bambini e ragazzi delle scuole primarie e delle scuole secondarie di primo grado nell'ambito della notte dei ricercatori a L'Aquila, nota come manifestazione "Street Science".

Nel 2018 ha partecipato come ospite esterno al progetto PON per il rafforzamento delle competenze di base presso l'Istituto Comprensivo Claudio Abbado di Roma rivolto ai bambini di scuola primaria. Nel 2017 Ha organizzato un progetto di laboratorio per gli studenti della terza media sulle celle solari di nuova generazione. Nel 2018 ha coordinato un progetto di coding di 40 ore per gli studenti del Liceo Scientifico di Amatrice, utilizzando, tra i vari strumenti, la programmazione di videogiochi.

Dal 2020 ad oggi ha tenuto seminari divulgativi sulla Matematica e sulla Computazione Quantistica. per ragazzi di scuole secondarie di primo grado.

#### ATTIVITA' DI FORMAZIONE DOCENTI

---

Dal 2018 al 2021 è stato organizzatore e docente per l'Università degli Studi dell'Aquila di corsi di formazione per insegnanti sulle metodologie didattiche innovative della Matematica, rivolti a docenti di scuole primarie e secondarie di primo grado di diverse regioni italiane. In questo periodo sono stati formati circa 100 insegnanti che hanno potuto sperimentare le nuove metodologie didattiche con più di 1000 bambini e ragazzi.

In particolare:

- 2018 - corso di formazione docenti per l'Istituto Comprensivo Claudio Abbado di Roma (8 ore in presenza).
- Ottobre 2019- feb 2020 - corso di formazione presso la Scuola Mariele Ventre de L'Aquila (10 ore in presenza)
- 2020-2022 - 3 corsi di formazione docenti organizzati dall'Università degli Studi dell'Aquila e dalla Sapienza Università di Roma (ciascun corso da 8 ore)
- Giugno-settembre 2022 – corso di formazione presso l'IC Don Milani di Latina (12 ore di formazione)

Dal 2022 è formatore per lo spin-off dell'Università dell'Aquila Stemblocks, da lui fondato, che si occupa della diffusione delle metodologie game-based integrate con il videogioco Matematica Superpiatta. In particolare, è stato formatore per i seguenti corsi di formazione docenti tutti su metodologie didattiche game-based per l'insegnamento/apprendimento della Matematica:

- Luglio 2022 - corso di formazione in presenza organizzato per il polo Steam Liceo Classico e Scientifico Statale "Pellico-Peano" di Cuneo (5 ore in presenza)
- Settembre-ottobre 2023 – 2 corsi di formazione organizzati per Future Labs dall'ITIS Natta di Bergamo. (ciascun corso da 25 ore totali di formazione)
- Ottobre 2022 – gennaio 2023 – 4 corsi di formazione organizzati per il polo Steam Liceo Classico e Scientifico Statale "Pellico-Peano" di Cuneo per Scuola Futura (ciascun corso da 25 ore totali di formazione)
- Gennaio 2023 – corso di formazione organizzati dall'IC di San Martino in Pensilis, CB, (25 ore totali di formazione).
- Gennaio-Febbraio 2023 – corso di formazione organizzati dall'IC di Sigillo, PG, (25 ore totali di formazione).

## ATTIVITA' DI RICERCA

Le attività di ricerca di LG ricoprono diversi ambiti

1) Sviluppo di metodi multiscala con correlazione elettronica  
Come Principal Investigator del progetto ERC MultiscalaChemBio (2009-2015), LG ha svolto attività di ricerca nel campo dello sviluppo di tecniche innovative per lo studio di sistemi molecolari nei quali la correlazione elettronica gioca un ruolo fondamentale. In particolare sono state sviluppate metodologie di Monte Carlo Quantistico anche in contesti multi-scala (quanto-classico). Le applicazioni vanno da piccole molecole inorganiche in fase gassosa fino a cromofori biologici nel loro ambiente proteico.

2) Composti molecolari e Materiali per la Catalisi dell'ossidazione dell'acqua  
Negli ultimi anni sono stati proposti numerosi catalizzatori per la reazione di ossidazione dell'acqua, che riveste un ruolo fondamentale nella costruzione di celle foto-elettrochimiche economiche su larga scala per la cosiddetta "Fotosintesi Artificiale". Tra le varie proposte rivestono particolare importanza quelle basate su composti basati su metalli di transizioni abbondanti sulla terra, come Fe, Ni, Mn e Co. I materiali, sia molecolari che solidi amorfi, sono stati caratterizzati sperimentalmente utilizzando numerose tecniche spettroscopiche per scoprirne le proprietà strutturali e rivelarne i meccanismi delle strategie catalitiche. L'utilizzo della modellizzazione molecolare riveste un ruolo fondamentale per interpretare questi risultati. Per esempio la combinazione di metodi teorici con i dati di spettroscopia x permette di comprendere a livello atomico i dettagli della superficie catalitica e di ipotizzare diversi meccanismi di reazione. Da quasi un decennio il gruppo di LG si occupa dello studio di questi sistemi con metodi di Chimica Computazionale per aiutare ad interpretare i dati sperimentale e per proporre possibili meccanismi catalitici. A titolo di esempio, è stato recentemente studiato un composto catalitico a base di cobalto proposto da D.Nocera (CoCat), per il quale sono stati suggeriti dei possibili cammini di reazione. Il gruppo ha inoltre una consolidata collaborazione con H. Dau and I. Zaharieva (Freie Univ. Berlin) che si occupano di diffrazione a raggi X. Lo scopo di questa attività di ricerca è quello di razionalizzare e descrivere la struttura dei siti attivi dei catalizzatori per poter comprendere il funzionamento ed aiutare il disegno di composti più efficienti. Parallelamente la ricerca si è svolta sulla Catalisi dell'ossidazione dell'acqua effettuata dall'unico enzima in grado di svolgere questo difficile compito: il Complesso del Fotosistema II. Negli ultimi anni il gruppo di LG sta completando uno studio esaustivo e dettagliato dei meccanismi molecolari alla base del ciclo catalitico di Kok-Joliot, ponendo le basi per un'interpretazione a livello molecolare dell'enorme quantità di dati strutturali, funzionali e spettroscopici disponibili su questo sistema. La comprensione del ciclo catalitico può inoltre aiutare a disegnare nuovi composti molecolari efficienti e sostenibili per l'ossidazione dell'acqua nel contesto della fotosintesi artificiale.

3) Modellizzazione Molecolare con i Computer Quantistici  
Dal 2018 è attiva una linea di ricerca sullo sviluppo di algoritmi di Chimica Teorica per l'utilizzo dei Computer Quantistici per il calcolo della struttura elettronica delle molecole. Attualmente sono coinvolti un assegnista di ricerca, un laureando ed un dottorando, finanziato nell'ambito dell'attività

MIUR "Dottorati innovativi con caratterizzazione industriale" in collaborazione con IBM-Italia. Tale attività di ricerca ha anche una collaborazione attiva con i laboratori di ricerca IBM di Zurigo.

4) Didattica della Matematica

Dal 2018 si occupa di ricerca nella Didattica della Matematica attraverso l'utilizzo delle nuove tecnologie. Ha partecipato come promotore a numerose sperimentazioni sul campo del videogioco da lui sviluppato "Matematica Superpiatta" nella scuola primaria e scuola secondaria di primo grado.

CRIC82100Q - A7BD8C9 - REGISTRO PROTOCOLLO - 0002834 - 23/03/2023 - IV.2 - E

*Lesandro Foster*