

Prof. Francesco A. Gianturco

Gennaio, 2009

Breve Curriculum Vitae e Interessi Scientifici

Si riassumono qui di seguito il profilo accademico, i riconoscimenti internazionali e gli interessi scientifici del Prof. Gianturco.

(i) Profilo Accademico

In questa sezione si intende riportare sia il periodo di studi in Italia e all'estero sia i gruppi di ricerca internazionali con cui il prof. Gianturco ha collaborato e collabora tutt'ora:

- 1) Laurea in Chimica Industriale presso l'Università di Bologna nel luglio 1961 (con lode) con una tesi in Chimica Teorica (relatore: Prof. C. Zauli);
- 2) Dottorato di ricerca in matematica applicata presso l'università di Oxford in cui si immatricola nel Settembre 1965. Da tale data fino al Gennaio 1970 lavora prima nel gruppo del Prof. C.A. Coulson, fondatore della Chimica Teorica moderna in Inghilterra e in Europa, e poi presso la Divisione di Fisica Teorica dell'Atomic Energy Research Establishment ad Harwell, nei pressi di Oxford, da dove mantiene la collaborazione con il Prof. Coulson. Nel Marzo 1968 gli viene conferito il titolo di D.Phil. (Doctor of Philosophy) dalla Facoltà di Matematica dell'Università di Oxford.
- 3) Nel Dicembre 1970 consegue la libera docenza in Chimica Teorica presso l'Università di Pisa, dove insegna dall'inizio dell'anno. Vi rimarrà fino al Novembre 1975, quando sarà chiamato a ricoprire la cattedra di Chimica Fisica presso l'Università di Bari (Facoltà di Scienze).
- 4) Negli anni 1971, 1973 e 1975 trascorre periodi di circa 6 mesi ciascuno presso il Dipartimento di Matematica Applicata e Fisica Teorica della Queen's University di Belfast, nell'Irlanda del Nord. Questo è uno dei centri più noti nel mondo per i problemi teorici di chimica fisica molecolare e di dinamica molecolare. Fondato dal famoso fisico atomico Sir Harry Massey, il centro di Belfast è cresciuto sotto la guida di illustri fisico-chimici teorici come Alec Dalgarno (ora ad Harvard), Sir David Bates e P.G. Burke. Il prof. Gianturco inizia allora la sua collaborazione con il prof. Burke e con altri colleghi del numeroso Dipartimento di Queen's, inviando spesso suoi studenti italiani a condurre

ricerche in Irlanda e ricevendo in Italia collaboratori inglesi di quella Università. L'argomento principale della collaborazione è il problema teorico dei trasferimenti d'energia di elettroni liberi in un gas molecolare e le modellistica microscopica delle varie reazioni che insorgono da tali processi.

- 5) Nell'anno 1979 inizia una nuova collaborazione con l'Istituto Max-Planck per l'Idrodinamica dell'Università di Göttingen, Rep. Fed. Tedesca. Questo Istituto sperimentale di grande dimensioni (più di 100 persone tra ricercatori e studenti dottorandi) è in quegli anni il più famoso nel mondo per lo studio dei fasci molecolari incrociati come tecnica di analisi microscopica delle reazioni chimiche. Il suo direttore, prof. P.J. Toennies, è stato più volte 'shortlisted' per il premio Nobel e tutti e tre i recenti premi Nobel per la chimica in questo settore (1986) sono stati consulenti di tale laboratorio. Il prof. Gianturco è a tutt'oggi consulente esterno per i problemi teorici del settore e, negli ultimi 20 anni, ha trascorso una media di circa due mesi l'anno presso tale istituzione producendo più di 50 lavori scientifici in collaborazione con ricercatori di quel laboratorio.
- 6) Dal 1983 una ulteriore collaborazione di ricerche teoriche è cominciata con ricercatori spagnoli, presentatisi di recente con grande energia sulla scena internazionale per allargare i loro orizzonti scientifici. La Divisione di Fisica molecolare del CNR spagnolo (a Madrid) e Dipartimenti di Chimica Fisica delle Università di Salamanca, Malaga e Complutense inviano regolarmente loro ricercatori presso il gruppo di ricerca del prof. Gianturco a Roma (dove è stato chiamato nel 1979 a ricoprire la 1^a cattedra di Chimica Quantistica di quella Università).

Altre collaborazioni internazionali oggi in attività sono le seguenti:

- (i) con il Dip. di Chimica dell'Indian Institute of Technology (IIT) Madras, India;
- (ii) con il Dip. di Chimica Teorica dell'Università di Bordeaux, Francia;
- (iii) con il Dip. di Chimica Fisica dell'Istituto di Tecnologia della Havana, Cuba;
- (iv) con la Divisione di Fisica Teorica dell'Istituto Indiano per la promozione delle Scienze, Calcutta, India;
- (v) con il Dipartimento di Chimica della Texas A & M University, College Station, Texas (USA);
- (vii) con il laboratorio di Fisica della Università Tecnica di Gdansk, Polonia;

(ii) Riconoscimenti Internazionali (una breve selezione)

- 1977: Eletto nel Comitato esecutivo della Conferenza Internazionale sulla Fisica delle Collisioni Atomiche e molecolari (ICPEAC);
- 1979: Chiamato a far parte dell'Editorial Board dell'Int. Journal of Quantum Chemistry;
- 1981: Eletto Chairman della Divisione di Fisica Atomica e Molecolare della Società Europea di Fisica;
- 1984: Chiamato a far parte dell'Editorial Board del Journal of Physics B dell'Istituto di Fisica Britannico;
- 1988: Eletto Fellow dell'American Physical Society ;
- 1989: Eletto Fellow della New York Academy of Sciences;
- 1989: Eletto Chairman della Conferenza Internazionale sui processi collisionali atomici e molecolari (ICPEAC). Carica biennale;
- 1992: Primo chimico italiano a ricevere il Forschungspreis della Von-Humboldt-Stiftung della Rep. Federale Tedesca;
- 1994: Eletto Fellow dell'Institute of Physics, Società Nazionale di Fisica della Gran Bretagna;
- 1995: Nominato Editor-in-Chief (prima volta per un italiano) della più diffusa rivista Europea di Fisica, "Europhysics Letters", per un periodo di sei anni;
- 1995: Riceve il Premio Max-Planck per la ricerca dal Governo della Germania, per la fisica chimica;
- 1996: Nominato "Löwdin Lecturer 1996" dalla Università di Uppsala, Svezia;
- 1997: Nominato Co-Editor della Rivista Internazionale "European Physics Journal D"
- 1998: Riceve il premio internazionale MOLEC per le sue ricerche in dinamica dei processi chimici

- 2001: Nominato Member of The Board della Rivista Internazionale “Molecular Physics”
- 2002: Nominato Editor-in-Chief dell’European Physical Journal D
- 2005: Eletto Fellow (1 di 5 in totale) della European Physical Society
- 2006 : Comandato al Centro Interdisciplinare Linceo "B.Segre", per tre anni.

Il prof. Gianturco è attualmente nell’Editorial Board di numerose Riviste Scientifiche Internazionali nel campo della Chimica Fisica Molecolare. E’ stato Presidente del Comitato di Gestione (dal Dicembre 1989 al Dicembre 1992) del Progetto “Numerical Intensive Computing” (NIC) del MURST presso l’Università di Roma “La Sapienza”, nonchè membro della Commissione ministeriale per il Calcolo Avanzato in Italia (dal 1990 al 1993). E’ stato nominato Presidente del Consiglio Direttivo del Consorzio Interuniversitario di Supercalcolo (CASPUR) nel 2002.

Il prof. Gianturco è stato responsabile di sede locale per diversi progetti Europei: all’interno del III e del IV Frameworks: “Human Capital and Mobility” (1993-2001); all’interno del V Framework: “Training and Mobility of Researchers” (2002-2006). Il suo gruppo inoltre è stato scelto come Training Centre per giovani ricercatori Europei nel campo della chimica-fisica teorica (periodo: 1994-1997).

(iv) Pubblicazioni

Il prof. Gianturco è autore di circa 520 pubblicazioni scientifiche nel periodo 1964-2009. Ha pubblicato in collaborazione con circa 60 giovani ricercatori italiani e con oltre 45 ricercatori non italiani di quindici paesi diversi.

E’ anche autore di un libro (pubblicato nel 1979 dalla Springer Verlag) ed è stato Editore di cinque libri monografici; tre pubblicati dalla Plenum Press, New York, uno dalla Springer Verlag di Heidelberg e uno dalla Kluwer Academic Publ. di Amsterdam.

(v) Progetti di Ricerca e Interessi Scientifici

Dal punto di vista della ricerca il prof. Gianturco è uno dei primi ricercatori che abbiano introdotto in Italia lo studio dei processi dinamici elementari in sistemi chimici (primo lavoro sull’argomento uscito nel 1967).

Si è così occupato di:

Chimica Fisica teorica dei processi dinamici elementari in gas molecolari, neutri e ionizzati. In particolare, ha lavorato nei seguenti settori:

- 1) Teoria delle perdite di energia di elettroni liberi in gas molecolari e modellistica degli effetti energetici in scariche nei gas;
- 2) Forze di interazione in molecole di Van der Waals di interesse astrofisico attraverso

l'interpretazione teorica di esperimenti di fasci molecolari incrociati;

3) Modellistica teorica delle reazioni ione-molecola in fase gassosa e calcolo delle perdite d'energia, nella materia interstellare, dovute a collisioni subtermiche;

4) Proprietà termodinamiche di non-equilibrio in miscele gassose ed effetti quantistici nelle equazioni del trasporto a basse temperature;

5) Studio della dinamica elementare dei processi di frammentazione e di metastabilità in cluster di gas rari, ionici e neutri;

In tali settori alcuni dei risultati più significativi possono essere considerati i seguenti:

- (i) elaborazione del trattamento teorico *ab initio* dei fenomeni di chemical shifts da fotoionizzazione e da emissione di fluorescenza. Tali teorie sono state uno dei primi trattamenti teorici dei processi poi convogliati nella spettroscopia ESCA. I lavori sono del periodo 1968-1970.
- (ii) messa a punto della teoria dello scattering a molti canali per i processi di collisione elettrone-molecola e di un programma generale completamente *ab initio* per le interazioni elettrone-molecola. Tali lavori iniziano nel 1972 ed hanno dato luogo a circa 90 pubblicazioni sull'argomento. Il prof. Gianturco è stato il primo ricercatore ad ottenere risultati numerici con metodi teorici per lo scattering di elettroni da molecole poliatomiche: nel 1972 ne ha sviluppato la teoria e nel 1976 ha ottenuto i primi risultati numerici.
- (iii) sviluppo di un modello di potenziale ottico per lo studio del rilassamento vibrazionale in gas molecolari. Tale modello è tuttora usato in cinetica gassosa per stimare il rilassamento in gas poliatomici (nel 1974).
- (iv) il prof. Gianturco ha sviluppato dal 1988 un metodo di calcolo rigoroso per lo studio delle proprietà di non equilibrio in miscele gassose, ottenendo per primo risultati per molecole poliatomiche (nel 1993).
- (v) nello studio delle collisioni ione-molecola, il prof. Gianturco ha studiato dal 1980 i processi di trasferimento di energia in gas ionizzati, sviluppando metodi di dinamica quantistica sia per collisioni inelastiche che per trasferimenti di carica. Nel 1990 ha ottenuto per primo risultati esatti per un sistema realistico molto studiato sperimentalmente: l' O_2H^+ .
- (vi) a partire dal 1997 ha cominciato lo studio con metodi stocastici (Diffusion Montecarlo) delle strutture quantistiche di impurezze molecolari (neutre e ioniche) in piccoli cluster di He e di Ar. I risultati per gli ioni sono stati anche simulati con metodi di Dinamica Molecolare *ab initio*.
- (vii) nel 2001 ha iniziato lo studio di processi reattivi e di collisioni superelastiche in gas molecolari ad energie ultrabasse e alle temperature dei nanokelvins;

- (viii) nel 2002 ha iniziato lo studio degli effetti elementari del “Radiation Damage” in sistemi biologici mettendo a punto un modello dinamico per l’analisi e la classificazione di anioni metastabili in biomolecole;
- (ix) all’inizio degli anni 2000 ha messo a punto un modello dinamico per lo studio di processi di annichilazione di positroni termici in gas poliatomici collegandolo con la presenza di stati virtuali in molecole vibrazionalmente eccitate.