

Curriculum Vitae della Dott.ssa Maurizia Palummo

Nascita: 9-1-1966 Roma

Nazionalità: Italiana

Stato civile: Coniugata, 2 figli

Indirizzo professionale: Dipartimento di Fisica Università di Roma Tor Vergata
Via delle Ricerca Scientifica 1, 00133 tel 06-7259-4894; Fax:
06-202-3507

Email: Maurizia.Palummo@roma2.infn.it

Lingue straniere: Inglese, Francese

Formazione

[1993–1990] Dottorato di Ricerca in Fisica. (Università di Roma “Tor Vergata”, Roma) Tesi : *Proprietà elettroniche (stato fondamentale e stati eccitati) di semiconduttori ad ampio gap* (Supervisore: Prof. C.M. Bertoni)

[1989–1984] Laurea in Fisica.(Università di Roma “Tor Vergata”, Roma) Tesi: *Proprietà ottiche dei centri $(F_2^+)_H$ in cloruro di sodio* (votazione finale : 110/110 con lode) (Relatore : Prof. U.M. Grassano)

[1984–1979] Scuola Media Superiore: Diploma di Maturità Classica, votazione finale : 56/60

Posizione Attuale

[dal 1/04] Ricercatrice Universitaria confermata, presso il Dipartimento di Fisica dell' Università "Tor Vergata" di Roma

Posizioni occupate

[01/04-04/99] Ricercatrice a tempo determinato dell'INFM presso unità di Ricerca di Roma II

[11/98-11/97] Borsista post-doc dell' INFM presso l'Università di Tor Vergata nel gruppo del Prof. R. Del Sole

[11/97-11/96] Borsista post-doc dell' INFM presso l'Università di Tor Vergata nel gruppo del Prof. R. Del Sole

[3/96-4/95] Borsista presso il centro ricerche ENEA unità di modellistica numerica di fluidodinamica atmosferica ed oceanica (AMB-CLIM-NUM) (Tutor: Dott. C. Ronchi)

[3/95-10/94] Borsista (borsa post-dottorato) INFM presso l'Università di Roma "Tor Vergata"

[09/94-07/94] Borsista sez. superfici dell'INFM all' Università di Roma, "Tor Vergata" (Tutor : Prof. C.M. Bertoni)

[06/94-11/93] Borsista INFM all' Università di Roma, "Tor Vergata" (Tutor : Prof. C.M. Bertoni)

Attività scientifica

Durante il periodo della tesi di laurea e nell'anno successivo alla laurea ho svolto attività di ricerca di tipo sperimentale occupandomi della caratterizzazione ottica tramite misure di assorbimento, emissione ed eccitazione di alcuni centri di colore ed impurezze ioniche di metalli di transizione in varie matrici isolanti.

Successivamente i miei interessi si sono spostati ad un settore teorico-computazionale della fisica della materia condensata, cioè quello del calcolo da primi principi della proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche dei materiali.

Nel periodo del dottorato, ho studiato vari semiconduttori bulk ad ampio gap, prima nell' ambito della teoria del Funzionale Densità e successivamente, grazie alla stretta collaborazione con la Dr.

Lucia Reining dell' Ecole Polytechnique (Paliseau France) ho iniziato ad interessarmi allo studio e all'utilizzo della teoria a multi-corpi delle funzioni di Green, che è l'approccio corretto per il calcolo degli stati eccitati.

Nel corso degli anni, nell'ambito della Teoria del Funzionale Densità mi sono occupata sia di aspetti tecnico computazionali, come lo sviluppo e l'applicazione di pseudopotenziali particolarmente adatti a descrivere materiali con molti atomi per cella o difficili da trattare a causa della presenza di atomi della prima riga della tavola periodica (N,O,F.. ect.) o metalli di transizioni e terre rare, ma anche di aspetti più fondamentali come lo sviluppo di un nuovo funzionale di scambio e correlazione con correzioni non locali, nel tentativo di superare l'approssimazione della densità locale.

Successivamente al dottorato, grazie ad alcune posizioni post-doc nel gruppo del Prof. Del Sole, mi sono dedicata allo studio delle proprietà ottiche lineari e non lineari di superfici di semiconduttori e di metalli nobili, sempre nell'ambito di teorie da primi principi. Infatti le spettroscopie ottiche, lineari (RAS, DRS) e non lineari (SHG) di superficie sono un mezzo potente per la loro caratterizzazione, tuttavia, spesso gli spettri sono di difficile interpretazione, ed è quindi molto importante poterli ottenere teoricamente.

La forte necessità di raggiungere un buon livello di accuratezza nella descrizione teorica delle proprietà ottiche delle superfici è il motivo principale per cui a partire dai primi anni 2000 mi sono focalizzata sullo studio oltre l'approccio di singola particella effettiva dello schema DFT, di quale fosse il ruolo di effetti di campo locale, self-energia ed interazione buca-particella nel calcolo della risposta ottica di varie superfici di semiconduttore del gruppo IV e III-V.

Con lo stesso tipo di approcci teorico computazionali, in collaborazione con il Prof. S. Ossicini dell' Università di Modena e anche il Prof. R. Rurali dell' ICMAB di Barcellona, mi sono dedicata allo studio delle proprietà elettroniche e spettroscopiche di strutture unidimensionali di Silicio e Germanio di grande interesse per applicazioni elettroniche ed opto-elettroniche.

In questi ultimi anni ho inoltre attivato una collaborazione con il gruppo del Prof. K. Yamashita del Dipartimento di chimica dell'Università di Tokyo con cui ho iniziato uno studio delle proprietà eccitoniche delle superfici dell'ossido di Titanio, materiale di notevole interesse per applicazioni nel campo della fotocatalisi e foto-voltaico. In particolare ci siamo occupati dello studio di tali superfici nella fase anatase e successivamente abbiamo effettuato uno studio di nuove fasi recentemente ottenute sperimentalmente in sistemi a ridotta dimensionalità come sheets e nanotubi.

Un altro campo di ricerca attivo è quello che ho in collaborazione con il gruppo del Prof. A. Rubio dell' Università dei Paesi Baschi (San Sebastian), che consiste nello studio tramite metodologie teorico/computazionali analoghe a quelle precedentemente descritte, di molecole organiche come le porfirine e dei loro aggregati sia oligomeri (catene unidimensionali con ponti etilenici) che in fase di cristalli. Anche questi materiali di tipo organico sono di grande interesse per la costruzione di celle solari alternative al Silicio e lo studio delle loro proprietà microscopiche e delle caratteristiche eccitoniche è quindi di notevole importanza per la comprensione dei meccanismi che possono portare a un miglioramento nell' efficienza delle celle solari.

Dall' estate del 2012, quando sono stata visiting scientist per circa 3 mesi presso il gruppo del Prof. J.C. Grossman del Dipartimento di Scienza dei Materiali del MIT (Cambridge, MA USA),

mi sono dedicata all'analisi con metodi *ab-initio* sia di stato fondamentale ed eccitato di materiali a bassa dimensionalità per celle solari eccitoniche di nuova generazione senza uso di polimeri che spesso limitano l'efficienza di quelle attuali.

In particolare nell'ambito di tale collaborazione ho recentemente sviluppato analiticamente ed implementato numericamente il calcolo *ab-initio* dei tempi di vita radiativi per sistemi bidimensionali applicandolo a vari dicalcogenoidi di metalli di Transizione (TMDC) che negli ultimi anni sono materiali bidimensionali, alternativi al grafene, attivamente studiati per le loro interessanti proprietà opto-elettroniche.

Anche grazie a vari network europei la mia attività di ricerca ha potuto usufruire nel corso degli anni di altre collaborazioni internazionali con vari gruppi leaders nel calcolo da primi principi degli stati eccitati. Tali collaborazioni sono continuate tramite il Network di Eccellenza Europeo "Nanoquanta" (<http://www.nanoquanta.eu/>) e successivamente grazie allo sviluppo del "European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF, www.etsf.eu).

Principali collaborazioni di ricerca attualmente attive al di fuori dell' Università di Roma "Tor Vergata"

- Dr. A. Marini CNR-ISM Montelibretti, Roma Italia *Effetti dinamici di self-energia elettrone-fonone nel calcolo delle proprietà elettroniche ed ottiche dei materiali. Calcolo ab-initio di funzioni spettrali e di spettri di assorbimento a temperatura finita*
- Prof.S. Ossicini, Univ. Modena e Reggio, Italia *Ruolo del confinamento quantistico ed effetti a multi-corpi nelle proprietà elettroniche ed ottiche di fili di Si, Ge e Si/Ge.*
- Dr. R. Rurali ICMAB Barcellona, Spagna *Calcolo dei livelli di drogante in forte confinamento quantistico in fili di semiconduttore di Si e Ge.*
- Prof. K. Yamashita Dept. Chemical Eng., Tokyo University Tokyo Giappone *Superfici e nanomateriali di ossido di titanio puri e ibridi (interfacce con grafene e/o molecole organiche) per applicazioni in foto-catalisi e foto-voltaico.*
- Prof. A. Rubio San Sebastian, Spagna *Studio con approcci ab-initio di stato eccitato di molecole organiche (porfirine), loro oligomeri e cristalli molecolari.*
- Prof. J. C Grossman, MIT Boston USA e M Bernardi Berkeley Univ. San Francisco USA *Nuovi Materiali bidimensionali. Studio proprietà elettroniche, tempi di vita radiativi*
- Dr. G. Cicero Dipartimento Dipartimento Scienza Applicata e Tecnologia, Politecnico di Torino *Funzionalizzazione con molecole organiche di calcogenoidi di metalli di Transizione (Transition Metal Dichalcogenoides) ingegnerizzazione della gap e dello spettro ottico*

Produzione scientifica

Ho pubblicato piú di 90 lavori di cui la maggioranza su riviste con referees anonimi, alcuni articoli su libri e vari preprints in fase di stesura e/o sottomissione (Elenco completo delle Pubblicazioni in fondo a tale documento). Alcuni articoli sono stati selezionati come Editor Choice e per apparire sul Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology. Un lavoro ha ricevuto la copertina della rivista.

In molti lavori compaio come primo o secondo autore; il numero dei coautori é nella maggioranza dei casi inferiore a cinque.

Molti lavori sono stati pubblicati su riviste con Impact Factor superiore a 3. In particolare: 3 Journal of Chemical Physics (IP=3.16), 24 Phys. Rev. B (IP= 3.7) , 2 Journal of Physical Chemistry C (IP=4.8), 5 Phys. Rev. Lett. (IP= 7.4), 1 ACS Nano (IP=12), 1 Advanced Functional Materials (IP = 9.7), 2 Nanoletters (IP = 13), 1 Chemical Review (IP=41.2)

Il numero di pubblicazioni su ISI in data 13/05/2015 é 90

Il Numero citazioni totali 1347 (1225 escludendo le self-citazioni)

$h_{index} = 21$, $h_c = 12$. Numero citazioni normalizzate : 56.12, Numero articoli (2005-2015): 47

Attività Didattica

Subito dopo la laurea e negli anni del Dottorato, ho svolto varie supplenze di Matematica e Fisica presso Scuole Medie Superiori.

- * Membro della Commissione dell' esame finale del XX ciclo del Dottorato "in Physics and Nanoscience" dell' Univ. Modena e Reggio Emilia, 3 Febbraio 2015
- * Membro della Commissione dell' esame di ammissione al XXX ciclo del Dottorato "Modelli matematici per ingegneria, elettromagnetismo e nanoscienze" Univ. Roma La Sapienza 6 Ottobre 2014
- * Membro Commissione di Dottorato del Dr. Leonardo Espinosa, San Sebastian Spagna 22 Ottobre 2013
- * Referee internazionale per la Tesi dottorato del Dr. Matteo Govoni 2013 Ecole Polytechnique, Paliseau Francia
- * Relatore tesi triennale in Fisica di Emanuele Tomó A.A. 2011-2012
- * Co-relatore tesi di Dottorato in Fisica del Dr. M. Amato (Univ. Modena e Reggio Emilia) A.A. 2009-2010
- * Co-relatore tesi magistrale in Fisica di Paolo Bagalá (Univ. Tor Vergata) A.A. 2008-2009
- * Co-relatore tesi di dottorato del Dr. M. Bruno (Univ. Tor Vergata) A.A. 2007-2008
- * Referee esterno della Tesi di Dottorato Dr. F. Iori, Univ. Modena e Reggio (2008)

- * Co-responsabile con il Prof. Del Sole dell'attività scientifica svolta da un altro laureando (Massimo Cini) e altri due dottorandi (Letizia Chiodo, Fabrizio De Fausti).
- * A.A. 2014-2015 sono stata docente del Corso "Struttura della Materia II" (6CFU) della Laurea Magistrale in Fisica dell' Università di Roma Tor Vergata
- * A partire dal A.A. 2012-2013 sono docente del Corso "Teoria dei solidi e Modelli Molecolari" (8CFU) della Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali dell' Università di Roma Tor Vergata
- * A partire dal A.A. 2012-2013 svolgo un ciclo di lezioni (circa 16 ore frontali) sulla teoria delle funzioni di Green all' interno del Corso tenuto dalla Prof. O. Pulci "Teoria Quantistica dei Solidi" della Laurea Magistrale in Fisica dell' Università di Roma Tor Vergata
- * Dal 2011 ho svolto un ciclo di lezioni per il Dottorato in Fisica dell' Università di Roma Tor Vergata (8 ore frontali) sulla "Teoria delle funzioni di Green per il calcolo delle proprietà elettroniche ed ottiche di nanostrutture". Nel 2013-2014 queste lezioni sono state svolte all' interno della scuola internazionale "Hands-on Tutorial on Excited State Spectroscopy: GW and BSE using the Yambo code" del codice MBPT yambo (Roma 7-9 Maggio 2014) www.yambo-code.org. a cui alcuni dei dottorandi di Fisica di Roma Tor Vergata hanno partecipato come corso a scelta del Dottorato da 3 cfu.
- * Dal A.A. 2007 al A.A. 2011, sono stata docente del Corso di Struttura della Materia 2 (6CFU) (Laurea Specialistica in Fisica, Univ. Tor Vergata)
- * Dal A.A. 2002 al 2010 sono stata Esercitatore del Corso di Fisica Atomica e Molecolare (Prof. Fanfoni, Laurea in Scienza dei Materiali) e successivamente di Struttura della Materia (Laurea in Fisica, Prof. Balzarotti).
- * A.A. 2004-2005 e 2005-2006, Univ. Tor Vergata, Docente del Corso Metodi Matematici per la Scienza dei Materiali (Laurea in Scienza dei Materiali 6CFU)
- * A.A. 2000-2001 e 2001-2002, Univ. Tor Vergata, esercitatore del Corso di Fisica Classica, (Laurea in Biologia Prof. M.P. De Pascale)
- * Pertanto allo stato attuale sono membro delle seguenti commissioni di esami: Teoria dei solidi e Modelli Molecolari, Teoria Quantistica dei Solidi, Struttura della Materia 2, Fisica Atomica e Molecolare, Struttura della Materia 1.
- * Nel 2012 sono stata membro della commissione di Dottorato in Fisica dell' Università di Roma Tor Vergata.

Altre attività, Riconoscimenti professionali, Responsabilità organizzative e/o scientifiche

- Da vari anni, svolgo attività di referaggio per varie riviste internazionali come: Phys. Rev. B, Phys. Rev. Letters, Applied Physics Letters, Chemical Phys. Letters, Advanced Functional Materials, Journal of Physics C, European Phys. Journal Phys. B, varie riviste della Elsevier ed IOP, Nature Scientific Reports;
- "Project reviewer" per:
 - i) l' American National Science Foundation ii) per l' Estonian Research Council iii) per la French National Research Agency ANR iv) per Austrian Science Foundation (FWF) v) per i progetti nazionali ISCRA-Cineca.
- Nel 2013 sono stata inserita nel pannello di esperti per referaggio di progetti di supercalcolo Europei PRACE
- Sono membro dell' Editorial Board della rivista scientifica "Scientific Reports" del Gruppo Nature Publishing
- Visiting Scientist presso il gruppo di Ricerca del Prof. J Grossman dal 8/3/2015 al 18/3/2015 al DMSE dell' MIT Cambridge Boston (USA)
- Visiting Scientist presso il gruppo di Ricerca del Prof. J Grossman dal 7/7/2014 al 7/8/2014 al DMSE dell' MIT Cambridge Boston (USA)
- Visiting Scientist presso lo stesso gruppo di Ricerca dal 25 Giugno/9 Settembre 2012 e dal 29 Gennaio al 10 Febbraio 2013.
- Ho vinto un ESF Short Visit Grant 8-13 July 2013 per recarmi a Grenoble per collaborare con Dr. E. Cannuccia e Dr. A. Marini (CNR-Rome) sullo studio di effetti di interazioni elettrone-fononi e spettri ottici a temperatura finita con metodologie ab-initio.
- La ricerca collegata al lavoro "Ultra-thin Photo-Voltaics" pubblicato sulla rivista NanoLetters nel 2013 é apparsa sulle MIT NEWS: <http://web.mit.edu/newsoffice/2013/thinner-solar-panels-0626.html>, materials online : <http://www.materials360online.com/newsDetails/40780>, optics news :<http://optics.org/news/4/7/10>, e numerose altre pagine web., ha prodotto un'intervista apparsa su Huffington Post il 28 Giugno 2013: <http://www.huffingtonpost.it>. Inoltre relativamente a tale ricerca é stata avviata la procedura per richiedere una United States Letters Patent EXTRAORDINARY SUNLIGHT ABSORPTION AND ONE NANOMETER THICK PHOTOVOLTAICS USING TWO-DIMENSIONAL MONOLAYER MATERIALS, spedita il 25-Jun-2013 e con numero seriale 61/838941 (Attorney Docket No.: 16422.114618)
- *Membro* del "Integration Team 3" del European Theoretical Spectroscopy Facility (<http://www.etsf.eu/>)
- *Membro* dell' "Integration Team 2" del Network Europeo di Eccellenza "Nanoquanta", con responsabilità del "Training and Reach out" del Network. (<http://www.nanoquanta.eu/>)

A partire dal 2001, ho partecipato alla stesura di vari progetti scientifici di ricerca nazionali (PRIN, FIRB) , Europei e progetti bilaterali di ricerca. Vari di questi progetti sono stati finanziati. Riporto elenco dettagliato ed esito.

- Esito non noto: Responsabile nodo Italiano del Progetto Bilaterale Italia/Francia Galileo "Nanosilicon Photonics with Nonlinear Applications" sottomesso a Febbraio del 2015
- Finanziato Co-Proponente del Proposal "Excitations in Realistic Materials using Yambo on Massively Parallel Architectures" per finanziamento della scuola omonima al Cecam di Losanna (13-17 Aprile 2015).
- Finanziato Co-Proponente del Proposal "Yambo2014 Hands-on Tutorial on Excited State Spectroscopy" al ESF Research Networking Programmes per organizzazione della scuola omonima al Cineca/Caspar di Roma (Maggio 2014).
- Non Finanziato: Responsabile nodo Italiano del Progetto Bilaterale Italia/Francia Galileo "Nanosilicon Photonics with Nonlinear Applications" sottomesso a Marzo del 2013
- Non Finanziato: Responsabile nodo Italiano del Progetto di grande rilevanza Italia/USA n.PGR01381 (2013): "Computational Design of nanomaterials for third-generation Photovoltaics"
- Finanziato Co-Proponente del proposal "Theory, Simulation and Modelling of SiGe Nanostructures" al ESF Research Networking Programmes per organizzazione del workshop internazionale omonimo al Cecam (Giugno 2012).
- Non finanziato (primo fra gli esclusi): Membro del Nodo di Roma Tor Vergata del FIRB n. RBFR129YPH004 (2012)
- Non finanziato (Primo fra gli esclusi): Responsabile nodo Italiano del Progetto Europeo Whiten CP-FP "White Light Emitting hybrid ZnO Nanostructures" ; FP7-NMP-2011 n.280723 (2010)
- Non finanziato Ho partecipato alla stesura del progetto europeo NMP.2001.4.05. "Nanoscale simulations for Photovoltaics" (2011)
- Finanziato Ho partecipato alla stesura e sono stata membro del progetto del European Union's Framework Programme 7 "FP7-INFRASTRUCTURES- 2007-1": ETSF (Project No. RI-211956) (2008-2011)
- Non finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto Firb "Meccanismi di eccitazione in materiali nanostrutturati per applicazioni fotovoltaiche" n. RBFR10FWPY (2010)
- Non finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto Firb "Efficiente generazione in nanostrutture funzionali a semiconduttore: verso il fotovoltaico di terza generazione" n. RBFRo8BXDH (2008)

- Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del Network of Excellence Nanoquanta NMP-CT-2004-500198 (2004-2008)
- Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del Network of Excellence Nanophase HPRN-CT-2000-00167 (2000-2004)
- Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del PRIN2007 9XA4HW004 "Progettazione di nuovi materiali nanostrutturati per applicazioni elettroniche ed ottiche attraverso la teoria a principi primi e la simulazione" (2007-2009)
- Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del PRIN2005 028257004 "Comprensione ab-initio delle proprietà strutturali, elettroniche, ottiche di sistemi asemiconduttori nanostrutturati a bassa dimensionalità" (2005-2007)
- Non Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del PRIN2004 029255004 "Metodi ab-initio per stati eccitati aspetti metodologici e applicazioni" (2004)
- Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del nodo di Roma del Progetto MIUR di Internazionalizzazione NANOSIM "Simulazioni su scala quantistica di nanostrutture e materiali avanzati" (2004-2007)
- Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del nodo di Roma del Progetto INNESCO CNISM "Will nanostructured Silicon be the lasing material of this century?" (2003-2005)
- Finanziato: Ho partecipato alla stesura del progetto e sono stata Membro del PRIN 2002 "Proprietà ottiche lineari e non lineari di nanostrutture e sistemi a bassa dimensionalità" (2002-2004)

Responsabile di vari user-projects ETSF qui di seguito riportati:

- Training Project n. 499 ((Spring 2013 ETSF evaluation of proposals) The excitonic effects on electronic and optical properties of Boron nitride Graphyne nano sheets: First-principles calculation sottomesso dal Mr Davoud Vahedi Fakhrrabad Iran, Islamic Republic
- Training Project n. 511 (Spring 2013 ETSF evaluation of proposals) The electronic and optical properties of hydrogenated boron nitride nanoribbon. sottomesso da Mr Mojtaba Ashhadi Damghan university Pirozi street Pirozi 23 Mashhad Iran, Islamic Republic
- Training Project n. 506 (Spring 2013 ETSF evaluation of proposals) Semiconductor quantum dots as sensitizers for solar cell sottomesso da Ezekiel Oyeniye Physics Department University of Ibadan, Nigeria

- Collaboration Project (Autumn 2012, ETSF evaluation of proposals) "Influence of two interacting tautomeric forms in the optical response of porphyrins deposited on graphite" sottomesso dal Dr. GianLorenzo Bussetti del Dip. di Fisica, Politecnico di Milano
- Collaboration Project (Autumn 2012, ETSF evaluation of proposals) Optical response calculations of the rebonded-step reconstructed Ge/Si(105) vicinal surfaces sottomesso dal Dr. Luca Persichetti Dept. Fisica Universita' di Roma Tor Vergata
- Collaboration Project (Autumn 2011 ETSF evaluation of proposals) "Non isovalent alloys for photocatalysis and photovoltaics" sottomesso dal Dr. G. Giorgi Univ. of Tokyo, Dept. of Chemical System Engineering
- Training project (Spring 2011 ETSF evaluation of proposals) "Many-body studies on III-V semiconductor alloys" sottomesso dal Dr. H. Kawai Dept. of Chemical System Eng. Tokyo Univ.
- Training project (Spring 2009 ETSF evaluation of proposals) "GW-BSE methods for semiconductor nanoparticles" sottomesso dal Dr. M. Voros Budapest University of Technology and Economy.
- Collaboration Project (Spring 2009 ETSF evaluation of proposals) "Optical anisotropy of Zn-porphyrines chemical sensors" sottomesso dal Prof. C. Goletti del Dip. Fisica Roma Tor Vergata
- Collaboration Project (Autumn 2009 ETSF evaluation of proposals) "A combined structural, electronic and optical analysis of low dimensional titania based systems" sottomesso dal Dr. G. Giorgi Univ. of Tokyo, Dept. of Chemical System Engineering

**Proponente o Membro di Progetti di Supercalcolo Nazionali ed Internazionali
Host di Progetti HPC-2 Europa**

(sottoposti a referaggio per essere accettati)

- Ho ospitato il Dr. F. Iori nell'ambito del HPC-Europa2 Transnational Access programme proposal 339- presso il Dip. di Fisica - Universita' Roma2 Tor Vergata, project title: "Ab initio study of the excited state properties of planar and layered silicon system: effect of doping and interlayer stacking"
- Ho ospitato il Dr. M Voros (25/5/2011-9/6/2011) nell'ambito del HPC-Europa2 Transnational Access programme - presso il Dip. di Fisica - Universita' Roma2 Tor Vergata, project title: "Ab initio study of the excited state properties of diamondoids"
- *Proponente* del Progetto di supercalcolo ISCRA-C n. HP10CXGIQB "Radiative lifetimes of two-dimensional Transition Metal Dichalcogenides" (Aprile 2014)

- *Membro* del progetto di supercalcolo ISCRA-C HP10CS5PO8 "Physics for art conservation: role of light and environment in darkening of colours in historical paintings 2013
- *Membro* del progetto di super calcolo ISCRA-B n. HP10B4SQA4 "Atomistic simulations of nanostructured silicon interfaces" 2013
- *Proponente* del Progetto di supercalcolo ISCRA-C n. HP10C80NSA "Tautomeric forms of Porphyrines on Graphite: energetics, electronic and optical properties" (2013)
- *Proponente* del Progetto di supercalcolo ISCRA-C 2012 TEXCAB n. HP10CMAA6K "Tunable Polymer-Free Excitonic Solar Cells from Ab-Initio Calculations" (2012)
- *Membro* del Progetto di supercalcolo ISCRA-C 2012 HONAPH n. HP10CGTXSL "Hybrid-hetero Oxide NANosheets for PHotovoltaics"
- *Membro* del Progetto di Supercalcolo Europeo DECI-7 2011 "DIAVIB: Effect of electron-phonon coupling on the electronic structure of small diamond cages"
- *Membro* del Progetto di Supercalcolo ISCRA-C 2011 n. HP10CVLI9N "Structural, Electronic and Optical Properties of a new class of Organic pi-coniugated MACromolecules for optoelectronic applications by ab-initio simulations"
- *Membro* del Progetto di Supercalcolo ISCRA-C 2011 n. HP10CSRUVJ "Electronic excitations and optical properties of fluorides"
- *Proponente* del Progetto di Supercalcolo ISCRA-B 2011 n. HP10BUJ6VJ "Ab-initio investigation of EXcited-state properties of NANOstructured TIO2-based materials"
- *Membro* del Progetto di Supercalcolo ISCRA-B HP10BQ6WV0 " Semiconductor Nanowire Design for Advance Device Applications" (2011)
- *Proponente* del Progetto di Supercalcolo ISCRA-B 2010 "A New Perspective in Semiconductor Nanoscience: Optoelectronic Properties of SiGe Alloyed Nanocrystals and Nanowires"
- *Membro* del Progetto di Supercalcolo Europeo 2010 DECI-6 "The optical properties of group IV semiconductor nanocrystals an ab initio many body perturbation approach"
- *Proponente* del Progetto di Supercalcolo del CINECA "Electronic and optical properties of complex systems" anno 2006
- *Proponente* del Progetto di Supercalcolo dell'Istituto Nazionale di Fisica della Materia "Excitonic effects on the optical spectra of surfaces" anno 2002
- *Proponente* del Grant Cineca di Supercalcolo "Effetti eccitonici su superfici e sistemi confinati", anno 2001

Organizzazione conferenze, workshops, scuole

- *Membro* del Comitato Organizzatore della scuola "Excitations in Realistic Materials using Yambo on Massively Parallel Architectures" Cecam EPFL-Lausanne 13-17 Aprile 2015 , (www.cecama.org , www.yambo-code.org)
- *Organizzatore locale* con il Dr. Andrea Marini del workshop "ETSF Collaboration Team on Electron-Vibrational Coupling" Roma 15-16 Gennaio 2015 , (www.yambo-code.org)
- *Membro* del Comitato Organizzatore della scuola "Hands-on Tutorial on Excited State Spectroscopy: GW and BSE using the Yambo code." Roma 7-9 Maggio 2014 , (www.yambo-code.org)
- *Membro* del Comitato Organizzatore del Workshop Internazionale "Theory, Simulation and Modelling of SiGe Nanostructures: from Nanoelectronics to Renewable Energy" Giugno 3-6 2013 CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland, (www.cecama.org)
- *Organizzatore* del Simposio "Optical Properties (special session dedicated to Prof. Rodolfo del Sole)" della conferenza Internazionale "ICFS" Genova 1-6 Luglio 2012
- *Membro* del Comitato Organizzatore del Workshop Internazionale "NW2012" Berlino 19-21 Settembre 2012
(<http://www.pdi-berlin.de/nanowires-2012>)
- *Membro* del Comitato Organizzatore del Workshop Internazionale "NW2011" Lesbos Grecia Giugno 2011
(<http://www.iesl.forth.gr/conferences/nw2011/default.html>)
- *Membro* del Comitato Organizzatore del Workshop Internazionale "NW2010" , Creta 27 Settembre al 1 Ottobre 2010
(<http://www.iesl.forth.gr/conferences/nw2010/default.html>)
- *Membro* del Comitato Organizzatore Locale del Workshop Internazionale "OSI-VIII" che si é svolto ad Ischia dal 7 al 11 Settembre 2009
(<http://osi8.roma2.infn.it/>)
- *Membro* del Comitato Organizzatore del Workshop Internazionale "40 Years of the GW Approximation for the Electronic Self-Energy: Achievements and Challenges", <http://www.nanoquanta.eu/>, Badonnes-Germania Settembre 2005
- *Membro* del Comitato Organizzatore e Organizzatore Locale del Workshop Internazionale "Theory and Modelling of Electronic Excitations in Nanoscience" <http://www.nanoquanta.eu/>, AcquaFredda di Maratea Settembre 2004

- *Membro* del Comitato Organizzatore del Workshop Internazionale "Ab-initio Electron-Excitations Theory: Towards Systems of Biological Interest", <http://www.nanoquanta.eu/>, San Sebastian Settembre 2003
- *Membro* del Comitato Organizzatore del Workshop Internazionale "Theoretical Approaches to the Electronic Structure and Optical Spectra of Materials" , <http://www.nanoquanta.eu/> Ottobre 2002

Lista Pubblicazioni Scientifiche:

- 105 Hiroki Kawai, Giacomo Giorgi, Maurizia Palummo, Koichi Yamashita "The role of local atomic configuration of $(Ga_{1-x}Zn_x)(N_{1-x}O_x)$ alloys on the visible light response: A combined GW + BSE first principle analysis" preprint
- 104 M. Palummo et al "Optical properties of H_2TPP and ZnTPP molecular crystals: a combined experimental and *ab-initio* theoretical investigation" preprint
- 103 M. Palummo, C.Hogan, S. Ossicini "Ab initio energy loss spectra of Si and Ge nanowires" preprint
- 102 L. Chiodo, G. Giorgi, M. Palummo 'Electronic and optical properties of oxide nanostructures by first-principles approaches' Invited article to appear on the Encyclopedia of Nanotechnology (Springer)
- 101 M. Bernardi, C. Ataca, M. Palummo, J.C. Grossman Optical and Electronic Properties of Two-dimensional Materials Invited Review Article to appear on 'Emerging Materials for Nanophotonics' in the journal Nanophotonics
- 100 M. Palummo, M. Bernardi, J.C. Grossman 'Exciton Radiative Lifetimes in Layered Transition Metal Dichalcogenides' 2015, 15 (5), pp 27942800
- 99 T. Demjan, M. Voros, Maurizia Palummo, A. Gali "Electronic and optical properties of pure and defected diamondoids studied by time-dependent density functional theory and many-body perturbation theory", The Journal of chemical physics 141 (6), 064308 (2014)
- 98 C. Goletti, L. Fazi, C. Hogan, L. Persichetti, A. Sgarlata, M. Palummo and A. Balzarotti "Oxidation of the reconstructed Ge/Si(105) surface : a reflectance anisotropy study" Phys. Stat. Solidi (2014)
- 97 G. Bussetti, M. Campione, L. Ferraro, L. Raimondo, B. Bonanni, C. Goletti, M. Palummo, C. Hogan, L. Duo', M. Finazzi, A. Sassella "Probing Two-Dimensional vs Three-Dimensional Molecular Aggregation in Metal-Free Tetraphenylporphyrin Thin Films by Optical Anisotropy" Journal of Physical Chemistry C 118 (29), 15649-15655
- 96 M. Amato, R. Rurali, M. Palummo, S. Ossicini "Understanding doping at the nanoscale: the case of codoped Si and Ge nanowires", J. Phys. D: Appl. Phys. 47 (2014) 394013
- 95 M. Amato, M. Palummo, R. Rurali, S. Ossicini "Silicon and Germanium Nanowires: Chemistry and Physics in Play, from Basic Principles to Advanced Applications " Chem. Rev., 2014, 114 (2), pp 13711412

- 94 R. Rurali, M. Amato, M. Palummo, S. Ossicini "Nanoscale Thermoelectrics" Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology Volume 16, 2014, pp 497-515
- 93 L.Chiodo, A. Iacomino, M. Palummo, A. Rubio "Titania nanostructures electronic and optical response" Handbook of Functional Nanomaterials, Nova Science Publishers, Ltd. (New Yor USA) (2013)
- 92 L. Fazi, C. Hogan, L. Persichetti, C. Goletti, M. Palummo, A. Sgarlata, and A. Balzarotti "In situ probing of subsurface stoichiometry on strained Ge/Si(105) facets" PHYSICAL REVIEW B 88, 195312 (2013)
- 91 G. Bussetti, M. Campione, M. Riva, A. Picone, L. Raimondo, L. Ferraro, C. Hogan, M. Palummo, A. Brambilla, M. Finazzi, L. Duo', A. Sassella, F. Ciccacci *Stable alignment of tautomers at room temperature in porphyrin 2-D layers* Adv. Functional Materials, DOI: 10.1002/adfm.201301892, (2013)
- 90 M. Bernardi M. Palummo, J.C. Grossman *Extraordinary Sunlight Absorption and 1 nm-Thick Photovoltaics using Two-Dimensional Monolayer Materials* Nano Lett., 2013, 13 (8), pp 3664-3670
- 89 M. Marsili, S. Botti, M. Palummo et al. *Self-energy effects on the electronic gap of semiconductor nanocrystals: germanium and silicon* J. Phys. Chem. C 117, 14229-14234 (2013)
- 88 C. Hogan, M. Palummo, J. Gierschner, A. Rubio *Correlation effects in the optical spectra of porphyrin oligomer chains: Exciton confinement and length dependence* Journal of Chem. Phys 138 (2013)
- 87 M. Amato, M. Palummo, R. Rurali, S. Ossicini *Optical absorption modulation by selective codoping of SiGe core-shell nanowires* J. Appl. Phys. 112, 114323 (2012)
- 86 M. Bernardi, M. Palummo, J. Grossman *Semiconducting Monolayer Materials as a Tunable Platform for Excitonic Solar Cells* ACS NANO 2012, 6 (11), pp 10082-10089
- 85 M. Palummo, G. Giorgi, L. Chiodo, A. Rubio and K. Yamashita *The Nature of radiative transitions in TiO₂ based nanosheets* J. Phys. Chem. C 2012, 116, 18495-18503
- 84 M. Bernardi, M. Palummo, J. Grossman *Optoelectronic Properties and Excitons in Hybridized Boron Nitride and Graphene Hexagonal Monolayers* Phys. Rev. Lett. 108, 226805 (2012)
- 83 E.Ferraro., C. Hogan, M. Palummo, R. Del Sole *Optical properties of the long-range Si(110)-16x2 reconstruction from first-principles* Physica Status Solid B, vol 248, 1148 (2012)
- 82 M. Amato, M. Palummo, S. Ossicini *Band Structure Analysis in SiGe Nanowires* Volume 177, Issue 10, 5 June 2012, Pages 705711

- 81 G. Giorgi, M. Palummo, L. Chiodo, K. Yamashita *Excitons at the (001) surface of anatase: spatial behavior and optical signatures* Phys. Rev. B 84, 073404 (2011)
- 80 G. Bussetti, B. Bonanni, S. Cirilli, A. Violante, M. Russo, C. Goletti, P. Chiaradia, O. Pulci, M. Palummo, R. Del Sole, P. Gargiani, M. G. Betti, C. Mariani, R. M. Feenstra, G. Meyer, and K. H. Rieder *Coexistence of Negatively and Positively Buckled Isomers on n+-Doped Si(111)-21* Phys. Rev. Lett. 106, 067601 (2011)
- 79 O. Pulci, A. Marini, M. Palummo, and R. Del Sole *Test of long-range exchange-correlation kernels of time-dependent density functional theory at surfaces: Application to Si(111)21*, Phys. Rev. B 82, 205319 (2010), selezionato come Editor suggestion
- 78 M. Palummo, M. Amato, S. Ossicini *Ab-initio opto-electronic properties of SiGe nanowires: role of many-body effects* Phys. Rev. B 82, 073305 (2010) selected for the August 30, 2010 issue of Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology.
- 77 S. Ossicini, M. Amato, R. Guerra, M. Palummo, O. Pulci *Silicon and Germanium Nanostructures for Photovoltaic applications: ab-initio results* Nanoscale Res. Lett. (2010) 1-13
- 76 R. Rurali, M. Palummo, X. Cartoixa *Convergence study of neutral and charged defect formation energies in Si nanowires* Phys. Rev. B 81, 235304 (2010)
- 75 M. Palummo, S. Ossicini, R. Del Sole, *Many-body effects on the electronic and optical properties of Si nanowires from ab-initio approaches* Phys. Status Solidi B, (2010)
- 74 M. Amato, M. Palummo, S. Ossicini *Segregation and Quantum Confinement Effect in [110] SiGe NWs*, to appear on Phys. Stat. Solidi B, 1-6 (2010)
- 73 M. Palummo, F. Iori, R. Del Sole, S. Ossicini *Giant excitonic exchange splitting in Si nanowires* Phys. Rev. B 81, 121303 (2010)R
- 72 O. Pulci, E. Degoli, F. Iori, M. Marsili, M. Palummo, R. Del Sole, S. Ossicini *Electronic and optical properties of Si and Ge nanocrystals: an ab-initio study* Superlattices and Microstructures 47, 178 (2010)
- 71 M. Amato, M. Palummo, S. Ossicini *SiGe Nanowires: structural stability, quantum confinement and electronic properties* Phys. Rev. B 80 235333 (2009)
- 70 A. Ruocco, L. Chiodo, A. Sforzini, M. Palummo, P. Monachesi, G. Stefani *Experimental and theoretical investigation of the pyrrole/Al(100) interface* Journal of Phys. Chem. A, 2009, 113 (52), pp 15193-15197
- 69 M. Marsili, O. Pulci, M. Palummo, P. L. Silvestrelli, R. Del Sole *Electronic and optical properties of acetylene and ethylene on Si(001)* Superlattices and Microstructures, Volume 46, Issues 1-2, July-August 2009, Pages 240-245

- 68 M. Palummo, F. Iori, R. Del Sole, S. Ossicini *Electronic properties and dielectric response of surfaces and nanowires of silicon from ab-initio approaches*, Superlattices and Microstructures, Volume 46, Issues 1-2, July-August 2009, Pages 234-239
- 67 M. Palummo, C.Hogan, F. Sottile, P. Bagala', A. Rubio *Ab initio electronic and optical spectra of free-base porphyrins: the role of electronic correlation* J. Chem. Phys. 131, 084102 (2009), una figura del lavoro e' stata selezionata come Cover della rivista
- 66 M. Amato, M. Palummo, S. Ossicini *Reduced Quantum Confinement effect and electron-hole separation in Si/Ge nanowires* Phys. Rev. B 79, 201302(R) (2009), selezionato come "Editor Suggestion and for May 25, 2009 issue of Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology".
- 65 C. Hogan, M. Palummo, R. Del Sole *Theory of dielectric screening and electron energy loss spectroscopy at surfaces* Comptes Rendus Physique, vol.10, Issue 6, Pages: 560-574 (2009)
- 64 M. Palummo et al., *RAS and SDR spectra at the Si(100) surface: a combined experimental and theoretical study* Phys.Rev B 79, 035327 (2009)
- 63 E.Cannuccia, O.Pulci, M.Palummo, V. Garbuio, R. Del Sole *Ab-initio optical spectra of complex systems* Phys. Stat. Solidi (c), no.8 pag. 2543 (2008)
- 62 F.Iori, E. Degoli, M.Palummo, S.Ossicini *Novel Optoelectronic Properties of Simulaneosly n- and p- doped Silicon nanostructures* Superlattices and Microstructures 44, 237-247 (2008)
- 61 M.Marsili, V.Garbuio, M.Bruno, O.Pulci, M.Palummo, E.Degoli, E.Luppi, R. Del Sole *Excited State Properties Calculations: from 0 to 3 dimensional systems*, in stampa su EPIOPTICS-9, The Science and Culture Series-Physics, World Scientific, Ed. Cricenti, (2007)
- 60 Mauro Bruno, M. Palummo, Andrea Marini, Rodolfo Del Sole and Stefano Ossicini *From Si nanowires to Porous Silicon: the role of the excitonic effects* Phys. Rev. Lett. 98, 036807-1 a 036807-4 (2007), selezionato per 2007 issue of Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology.
- 59 M. Palummo et al. *Ab-initio electronic and optical properties of low dimensional systems: from single particle to many-body approaches* surface science Volume: 601, Issue: 13, July 1, 2007, pp. 2696-2701
- 58 M.Bruno, M. Palummo, S.Ossicini, R. Del Sole, *First-principles optical properties of Silicon and Germanium nanowires* surface science Volume: 601, Issue: 13, July 1, 2007, pp. 2707-2711
- 57 M. Palummo et. al., *Ab-initio calculation of the Many-body effects on the EEL spectrum of the C(100) surface* Phys. Rev. B 74, 235431 (2006)

- 56 O. Pulci, M. Marsili, P. Gori, M. Palummo, A. Cricenti, F. Bechstedt, R. Del Sole *Geometry and electronic band structure of surfaces: the case of Ge(111):Sn and C(111)* Appl. Phys. A 85, 4 pag. 361 - 369 (2006)
- 55 L. Chiodo, M. Bruno, M. Palummo, and P. Monachesi *First-principles optical spectra of low dimensional systems: single particle and many-body approaches* phys. stat. sol. (b) 242, 3032 (2005)
- 54 M. Palummo, M. Bruno, R. Del Sole, S. Ossicini *Ab-initio excited states calculations of semiconductor materials: from bulk to low dimensional systems* in: Physics, Chemistry and Application of Nanostructures, pag.3-10, edited by V. E. Borisenko, S. V. Gaponenko, V. S Gurin, World Scientific (2005)
- 53 O. Pulci, M. Palummo, M. Marsili, R. Del Sole *Theory of Surface Optical Properties* Adv. in Solid State Phys. Vol. 45, 161-172, Ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2005)
- 52 M. Palummo et al. *Reflectance anisotropy spectra of the diamond (100) 2×1 surface: evidence of strongly bound surface state excitons*, Phys. Rev. Lett. 94, 087404 (2005)
- 51 M. Bruno, M. Palummo, R. Del Sole, V. Olevano, A. Kholod, S. Ossicini *Excitons in Germanium Nanowires: Quantum Confinement, Orientation and Anisotropy Effects* Phys. Rev. B 72, 153310 (2005), selected for the October 31, 2005 issue of Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology
- 50 G. Satta, G. Cappellini, M. Palummo, G. Onida, *Electronic and Optical properties of SiGe Alloys within first-principles schemes* Proceedings of Mat. Res. Soc. Fall Meeting 2004, Boston, USA 29/11-03/12/2004, B9.20, **829**, 2004.
- 49 M. Palummo et al. *The Bethe-Salpeter equation: a first-principles approach for calculating surface optical spectra*, J. Physics: Cond. Matter 16 (2004) S4313-S4322, IOP Publishing, Ltd
- 48 R. Del Sole, O. Pulci, M. Palummo *Theory of surface optical properties* EPIOPTICS-7, The Science and Culture Series-Physics, pag.1-20, World Scientific, Ed. Cricenti, (2004)
- 47 G. Cappellini, G. Satta, M. Palummo, G. Onida *Ab initio optical properties of BN(110) and GaN(110) surfaces*, EPIOPTICS-7, The Science and Culture Series-Physics, World Scientific, pag.44-51, Ed. Cricenti (2004)
- 46 M. Palummo, O. Pulci, R. Del Sole *First-principles optical spectra of semiconductor surfaces: from one-particle to many-body approach*, EPIOPTICS-7, The Science and Culture Series-Physics, pag.29-42, World Scientific, Ed. Cricenti, (2004)
- 45 Olivia Pulci, Pier Luigi Silvestrelli, Maurizia Palummo, Francesco Ancilotto, and Rodolfo Del Sole *Ab-initio study of the adsorption of acetylene on Si(001) surface*, Phys.Stat. Solidi (c), pag. 15 (2003)

- 44 P.Silvestrelli, O.Pulci, M.Palumbo, R. Del Sole, F. Ancilotto *First-principle study of acetylene adsorption on Si(100) : the end-bridge structure* Phys. Rev. B 68,pag.235306-1 a 235306-5 (2003)
- 43 R. Di Felice, C. A. Pignedoli, C. M. Bertoni, A. Catellani, P. L. Silvestrelli, C. Sbraccia, F. Ancilotto, M. Palumbo, O. Pulci *Ab-initio investigation of the adsorption of organic molecules at Si(111) and Si(100) surfaces*, Surface Science Vol. 532-535, (2003), pp. 982-987, Ed. Elsevier Science
- 42 P. Monachesi, M.Palumbo, R. Del Sole, A. Grechnev, , O. Eriksson *Ab-initio calculation of depth-resolved optical anisotropy of the Cu(110) surface* Phys. Rev. B 68, 035426 (2003)
- 41 G. Cappellini, G. Satta, M.Palumbo, G. Onida *Anisotropy of Surface Optical Properties at BN(110): an ab-initio study* Phys. Rev. B 66, pag.115412-1 a 115412-7 (2002)
- 40 J.E.Mejia, B.Mendoza, M. Palumbo, G. Onida, R.Del Sole, S.Bergfeld and W. Daum *Surface second-harmonic generation from Si(111):H: theory versus experiment* , Phys. Rev. B 66, 195329 (2002)
- 39 G. Satta, G. Cappellini, M. Palumbo,G.Onida *Ab initio optical properties of BN in the cubic and in the layered hexagonal phase* Computational Materials Science 22, p. 78-80 (2001)
- 38 M.Palumbo, G. Onida, R. Del Sole, M. Rohlfing *Negative buckling of Pandey chains at the Germanium cleavage surface* HIGHLIGHTS INFM 2000-2001, sez. 6 pag. 94
- 37 P. Monachesi, M.Palumbo, R. Del Sole , R. Ahuia, O. Eriksson *Optical properties of Cu and Ag (110) surfaces from ab-initio Theory*, published on the volume *Electrons and Photons in Solids - A volume in honour of Franco Bassani*, 347, edited by G. Grosso, G. La Rocca and M. Tosi, Quaderni della Scuola Normale Superiore, Pubblicazioni della classe di Scienze, Pisa (2001)
- 36 G. Onida, W.G. Schmidt, O.Pulci, M.Palumbo, A. Marini, C. Hogan, R. Del Sole *Theory for Modeling the optical properties of surfaces* phys. stat. sol. (a), 188, no.4 p. 1233-1242 (2001)
- 35 O.Pulci, M.Palumbo, V. Olevano, G. Onida, L. Reining, R. Del Sole *Many-body effects on the electronic and optical properties of bulk GaP* Phys. Stat. Sol. (a) 188, no. 4, pp.1261-1266 (2001), Ed. Wiley-VCH Verlag Berlin GmbH
- 34 G. Cappellini, G. Satta, M. Palumbo, G. Onida, *Ab-initio calculation of the optical properties of BN(110) surface* Material Research Society Symposium Proceedings, Vol. **677**, AA6.2.1-AA6.2.5(2001).
- 33 Patrizia Monachesi,Maurizia Palumbo, Rodolfo Del Sole,Rajeev Ahuja, Olle Eriksson *Reflectance Anisotropy Spectra of Cu- and Ag- (110) surfaces from ab-initio theory*, Phys. Rev. B **64**, pag. 115421-1 a 115421-5 (2001)

- 32 A. Stella, P.Tognini, P. Cheyssac, R. Kofman, M. Palummo, G. Onida, R. Del Sole *Optical spectra of Germanium nanocrystals: experiments and theory* proceeding del congresso ICPS'25, Settembre 2000 Osaka
- 31 M. Palummo, G. Onida, R. Del Sole, A. Stella, P.Tognini, P. Cheyssac, R. Kofman, *Optical Properties of Germanium quantum dots* phys. stat. sol. (b) 224, No. 1, pag. 247-251, (2001)
- 30 P. Monachesi, A. Marini, G. Onida, M. Palummo, and R. Del Sole *All-electron versus pseudopotential calculation of optical properties: The case of GaAs*, Phys. Stat. Solidi (a), vol. 184 no.1 pag. 101-104 (2001);
- 29 G. Satta, G. Cappellini, M. Palummo, G. Onida, *Optical Properties of BN in the cubic and in the layered hexagonal phases*, Phys. Rev B. **64**, pag. 035104-1 a 035104-11 (2001)
- 28 M. Meyer, G. Onida, M. Palummo, L. Reining 'Ab initio' pseudopotential calculation of the equilibrium structure of tin monoxide, Phys. Rev. B **64**, pag. 045119-1 a 045119-9 (2001)
- 27 Bernardo Mendoza, Maurizia Palummo, Giovanni Onida and Rodolfo Del Sole *Ab-initio calculation of second-harmonic-generation at the Si(100) surface*, Phys. Rev. B, 63, 205406 (2001)
- 26 M.Rohlfing, M.Palummo, G.Onida, R.Del Sole, *Structural and optical properties of the Ge(111)-(2x1) surface*, Phys. Rev. Lett. 85, 5440 (2000)
- 25 P. Monachesi, M. Palummo, R. Del Sole, R. Ahujia, O. Eriksson *Optical properties of Cu(110) surface* Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol.579, pag. 59-63 (2000)
- 24 Lucia Reining, Olivia Pulci, Maurizia Palummo, Giovanni Onida, *First-principles calculations of electronic excitations in clusters*, Int. J. of Quantum Chemistry vol. 77, pag. 951-960 (2000), Ed. John Wiley and Sons, Inc.
- 23 Valerio Olevano, Maurizia Palummo, Giovanni Onida, Rodolfo Del Sole *Exchange and correlation effects beyond the LDA on the dielectric function of silicon*, Phys. Rev. B, vol.60, pag.14224 (1999)
- 22 J. Power, W. Richter, M. Palummo, G. Onida, R. Del Sole *Monohydride Formation on Vicinal Si(001) Investigated by Reflectance Anisotropy Spectroscopy*, Phys. Stat. Solidi (a), vol 175,63 (1999)
- 21 M. Palummo, G. Onida, R. Del Sole, *Optical properties of Germanium Nanocrystals*, Phys. Stat. Solidi (a), vol.175, 23 (1999)
- 20 M. Meyer, G. Onida, M. Palummo, L.Reining Computer Physics Communications, Volumes 121-122, September-October 1999, Page 700

- 19 Olivia Pulci, Maurizia Palummo, A. Shkrebtii, G. Onida, R. Del Sole *Theoretical Study of the surface optical properties of clean and hydrogenated GaAs(110)*, Phys. Stat. Solidi (a) vol.175, pag.71-76 (1999)
- 18 Maurizia Palummo, Giovanni Onida, Rodolfo Del Sole, Bernardo Mendoza *Ab initio optical properties of Si(100)* , Phys. Rev. B, vol 60, n.4 pag. 2522 (1999)
- 17 Maurizia Palummo, Rodolfo Del Sole, Giovanni Onida, Massimiliano Corradini e Lucia Reining *Nonlocal Density scheme for electronic-structure calculations* , Phys. Rev. B, vol. 60 , 11329(1999)
- 16 Giovanni Onida, Rodolfo Del Sole, Maurizia Palummo, Olivia Pulci and Lucia Reining, *Ab-initio calculation of the optical properties of surfaces* , Phys. Stat. Solidi (a) 170,365 (1998)
- 15 Massimiliano Corradini, Rodolfo Del Sole, Giovanni Onida and Maurizia Palummo *Analytical expressions for the local-field factor $G(q)$ and the exchange-correlation kernel $K_{xc}(r)$ of the homogeneous electron gas*, Phys. Rev. B. 57 n. 23, 14569, (1998)
- 14 M. Palummo, G. Onida, R. Del Sole, Lucia Reining *Electronic Structure Calculations beyond the Local Density Approximation : application to Silicon*, Proc. of the ICPS XXIII Edited by M. Scheffler and R. Zimmermann p. 609, Berlin, World Scientific, (1996).
- 13 M. Palummo, R. Del Sole , L. Reining, G. Cappellini, *Screening models and simplified GW approaches : Si and GaN as test cases* , Solid State Comm., vol.95, no.5, pag. 393 (1994)
- 12 M. Palummo, Lucia Reining, R.W. Godby, C.M. Bertoni, N. Börsen, *Electronic Structure of Cubic GaN with Self-Energy Corrections* Europhys. Lett., 26 pp.607-612 (1994)
- 11 M. Palummo, Lucia Reining, M. Meyer, C.M. Bertoni *Electronic Structure of Stannic Oxide with Self-Energy Corrections* Proc. of the 22nd Conf. on the Physics of Semiconductors, Vancouver, 1994, edited by D.J. Lockwood, World Scientific Singapore, (1995)
- 10 M. Palummo, Lucia Reining, P. Ballone *First principles simulations*, J. Phys. iv 3 (C7), 1955-1964 part.23 Nov. 1993
- 9 M. Palummo, Lucia Reining, R.W. Godby and C.M. Bertoni *Gallium Nitride: Ground State properties and excited states*, Vuoto e Tecnologia n.4 (1992)
- 8 M. Palummo, Lucia Reining, R.W. Godby, C.M. Bertoni *Electronic structure with Self-Energy corrections for gallium nitride*, Conference Proceedings of XXI International Conference on the Physics of semiconductors, Beijing - China (agosto 1992)

- 7 M.Palumbo , C.M.Bertoni, L.Reining, F.Finocchi
Electronic Structure of Gallium Nitride, Physica B 185, pag. 404-409 (1993)
- 6 M.Buongiorno Nardelli, F.Finocchi, M.Palumbo , R.Di Felice , C.M. Bertoni, F.Bernardini, S.Ossicini
Hydrogen covered Si (111) surfaces ,Surf. Science vol.269-270 pag. 879 (1992)
- 5 A.Scacco , S.Fioravanti, M.Missori, U.M.Grassano, A.Luci, M.Palumbo, E.Giovenale, N.Zema,
Titolo: *Optical Absorption of Tl^+ ions in $KMgF_3$ crystals*, J.Phys. Chem. Solids Vol. 54, No. 9, pp. 1035-1041, (1993)
- 4 M.Casalboni, D.deViry, U.M.Grassano, A.Luci, M.Palumbo, A.Scacco,
Optical properties of $(F_2^+)_H$ in $NaCl : SH^-$ crystals , Phys. Status Solidi B, Vol. 170, pag. 675-680 (1992)
- 3 G.Baldacchini, M.Cremona, M.Casalboni, D. de Viry, U.M.Grassano, A.Luci, M.Palumbo, L.Casalis, P.Minguzzi, F.Pozzi, M.Tonelli and A.Scacco
Optical properties of $(F_2^+)_H$ and F-aggregate centers in $NaCl : OH^-$ crystals, Phys. Rev. B, Vol. 44, No. 22, pag.12189 (1991)
- 2 I.Casalis, P.Minguzzi, P.Pozzi, M.Tonelli, A.Scacco, M.Casalboni, D. deViry, U.M.Grassano, M.Palumbo, G.Baldacchini, C.Cremona
Optical properties of $(F_2^+)_H$ centers in $NaCl:OH^-$ crystals, Radiation Effects and Defects in Solids 119, 547-552 Part.2 1991
- 1 D.deViry, M.Casalboni, M.Palumbo, N.Zema *VUV Excitation levels of Cr^{3+} luminescence in Indium Fluoride Garnet*, Solid State Communications, Vol.76, No.8, pp.1051-1054 (1990)

Partecipazioni a Scuole, Conferenze e Workshops

Seminario su Invito "Novel layered Materials for solar harvesting applications", EMRS-2014 Fall Meeting Warsaw 15-19 Settembre 2014

Seminario su invito "Optical absorption and the Bethe-Salpeter Approach" "Hands-on Tutorial on Excited State Spectroscopy: GW and BSE using the Yambo code" Roma 7-9 Maggio 2014

Contributo Orale: NanoTP conference Nantes 2-5 April 2014 "Two-Dimensional semiconducting materials for ultrathin opto-electronic and photo-voltaic devices"

Seminario su invito 4th Annual World Congress of Nanoscience and Technology (NanoST-2014), to be held from October 29 to 31, 2014 in Qingdao, China. rifiutato per scarsità di fondi

Seminario su invito EMN East Meeting, taking place from May 12 to May 15, 2014 at Beijing, China rifiutato per scarsità di fondi

Seminario su invito Conferenza Internazionale InfoTech-2014 19-21 Giugno 2014, rifiutato per scarsità di fondi

Seminario su invito al workshop Internazionale CECAM "Nanostructured Zinc Oxide and related materials" 25-30 Giugno 2014, rifiutato per motivi personali.

Seminario su invito Mini-Total Energy EPFL Lausanne (Switzerland) 9-11 Gennaio 2014, rifiutato per impegni didattici

Seminario su invito 2013 ICSS Meeting (December 15-18, Las Vegas), rifiutato per motivi personali

Seminario su Invito "Two-Dimensional Materials for ultrathin optoelectronic devices", ETSF Conference Luxemburg 1-4 Ottobre 2013

Contributo orale: "Novel 2d-materials for opto-electronics and photo-voltaics", FISMAT Milano 9-13 Settembre 2013

Seminario su invito "Novel nanoscale materials for optoelectronic and Solar Energy Harvesting applications" NanoCenter Annual Conference 2013, Royal Rimoni Dead Sea Hotel April 3-4 2013

Contributo orale "Excitons at the (001) surface and nanosheets of anatase TiO₂ : optical signatures and spatial behavior" , "OSI-IX" Akumal, Mexico 19-23 September 2011

Contributo orale: "Optical properties of 2-D TiO₂ Anatase Systems: A First-principles Investigation", "DMD-Teoc11 workshop" Rome 21-22 February 2011

Seminario su invito "Silicon and Germanium nanostructures for opto-electronic and photovoltaic applications: ab-initio results", "MRS Fall Meeting" Boston, 29 November-3 December 2010

Contributo orale: "Excitonic Behavior in 2-D TiO₂ Anatase Systems: A First-principles Investigation", "MRS Fall Meeting" Boston, 29 November-3 December 2010

Seminario su invito "Materials for opto-electronic applications: ab-initio calculations and modelling", "Nanoscience and Nanotechnology workshop N&N2010" INFN, Frascati 20-23 September 2010

Contributo orale: "Opto-electronic properties of porphyrine oligomers: an ab-initio study" NanoSeA2010, Cassis- France 28 June-2 July 2010

Seminario su invito: "Quasi-particles and excitons in Silicon Nanowires: effect of Doping, Surface Termination and Mixing" OSI-VIII Conference 7-11 September 2009 Ischia

Seminario su invito: "Quasi-particles and excitons in Silicon Nanowires: effect of Doping and Surface Termination" Cecam Workshop 6-8 July 2009 Lausanne

Contributo orale: "Excitons in pure and doped Silicon Nanowires: a first principle study", E-MRS *Symposium K of the E-MRS Spring Meeting*, 12-06-2009 Strasbourg 8-12 Giugno 2009 , France

Contributo orale: "Doping and Codoping in Silicon Nanowires", CMD-22 *The 22nd General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society*, 25-29 August 2008 , Rome Italy

Seminario su invito: "Electronic properties and dielectric response of semiconducting surfaces and nanostructures from ab-initio approaches" Nanosea2008 7-10 July 2008 MontePorzio Catone, Rome Italy

Seminario su invito: "Semiconducting nanowires: from one-particle to many-body approaches" Cecam-Psi-K Workshop 9-12 June 2008 Lyon France

Seminario su invito: "First-principles optical spectra of semiconducting surfaces and nanowires: the role of the excitonic effects", 12th Nanoquanta Workshop 18-22 September (2007), Aussois France

Seminario su invito: "First-Principles optical and energy loss spectra of one-dimensional nanostructures of Silicon", Epioptics 2006, Erice 20-26 July (2006)

Contributo orale: "Energy Loss Spectra of nanowires, nanotubes and nanolayers of Silicon: an ab-initio study", "Nanosea 2006" Aix-en-Provence, 2-7 Luglio 2006

Poster: "Ab-initio electronic and optical properties of Germanium Quantum wires", Workshop EXC2004, Acquafredda di Maratea 20-22 Settembre 2004

Seminario su invito: "Semiconductor nanowires: ab-initio electronic and optical properties beyond the one-particle approach", OSI 2005, Aalborg, Denmark 6-10 June, (2005)

Contributo orale: "Dielectric Response of clean and covered surfaces from first-principles approaches", Congresso INFM Genova 8-10 June 2004

Seminario su invito: "First-principles optical spectra of semiconductor surfaces: from one-particle to many-body approach", Epioptics-7 20-26 July 2002

Contributo orale e poster: "First principles excited states in material science", Primo workshop Ricercatori INFM, Genova, 18-19 Aprile 2002

Contributo orale: "Many-body effects on the optical properties of the (100) Diamond and Silicon surface", Nanophase workshop, Lyon (France) , October 12-13 2001

Poster: "Ab-initio calculation of the optical properties of GaN(110) surface", INFM Meeting "Roma 18-21 Giugno 2001

Contributo orale: "Ab-initio calculation of SHG at Si(100) surface", 25th ANNUAL MEETING: ADVANCES IN SURFACE AND INTERFACE PHYSICS" MODENA (ITALY), December 18-19, 2000.

Contributo orale: "Calculations of the spectroscopic properties of real materials", Workshop "Modelling through Numerical Simulations" Roma, 'Tor Vergata' 17 - 18 Gennaio 2000

Contributo orale: "Optical properties of Germanium nanocrystals", SIO'99 St. Maxime , France, May 4-8 1999

Contributo orale: "Ab-initio calculation of the linear and non linear optical properties of the Si(100) surface", XXIII Annual meeting Advances in Surfaces and Interfaces Physics, Modena, Dicembre 21-22 1998

Contributo orale: "Calculation of the dielectric function of Si beyond the Local Density Approximation", II congresso Nazionale dell'INFM , Rimini 25-30 Giugno 1998

Poster: "Study of the surface optical properties of clean and hydrogenated GaAs(110) and Si(100)", II congresso Nazionale dell'INFM , Rimini 25-30 Giugno 1998

Poster: "Electronic properties of SnO_2 ", Seventh International Workshop on Condensed Matter Physics Trieste , Gennaio 1995

Contributo orale: "Electronic properties of semiconductors and insulators: computing the behaviour of complex systems", Lione Francia, Settembre 1994

Poster: "GW corrections to the LDA bandstructure of Stannus bioxide" XXII International Conference on the Physics of semiconductors Vancouver (Canada), Agosto 1994

Poster: "Ground state properties of cubic and wurzite GaN", XII Italian Convention "*Theoretical Physics and Condensed Matter*", Fai della Paganella (Trento), Italia, Aprile 1993.

Contributo orale: "First-principles calculation of the self-energy corrections to the bandstructure of cubic GaN", XVII Annual Meeting "*Advances in Surface and Interface Physics*", Modena, Italia, Dicembre 1992

Contributo orale: "Self energy corrections for excited states and localized states", European Community Workshop, Parigi, Francia, Settembre 1992

Contributo orale: "Calcolo ab-initio con pseudopotenziali a norma conservata delle proprietà di stato fondamentale e di stato eccitato del GaN", Wide-Band-Gap Semiconductors" Trieste, Giugno 1992

Partecipazione: II "*Italian-Swiss Workshop on Computational Condensed Matter Physics*", Santa Margherita di Pula (Cagliari), Settembre 1991

Partecipazione: X Italian Convention "*Theoretical Physics and Condensed Matter*", Fai della Paganella (Trento), Aprile 1991

Contributo orale: "Studio dei livelli VUV di eccitazione del Cr^{3+} in un cristallo di $Na_3In_2Li_3F_{12}$ ", Congresso SIFTrento 8-13 Ottobre 1990

Partecipazione: VI Europhysical Topical Conference: Lattice Defects in Ionic Materials, Groningen 3-7 Settembre 1990

Seminari presso Enti di ricerca e/o Università

"Two-dimensional nanosheets for opto-electronic applications", Weekly Theoretical-Condensed-Matter-Physics "Philippe Nozieres" Seminar and Monthly CPTG Colloquium, CNRS Grenoble 12 July 2013

"Electronic and Optical Properties of NanoMaterials from parameter-free approaches" Dipartimento di Fisica, Università di Tor Vergata, 13-6-2007

"Many-body effects on the dielectric response of semiconductor surfaces and nanowires" Dipartimento di Fisica, Università di Tor Vergata, 13-9-2006

"Proprietà ottiche di dots di Germanio", Dip. Ingegneria Elettronica 20-11-2000

"Studio da primi principi di sistemi condensati", Università di Tor Vergata, 1-6-1992

'Pseudopotenziali soffici per l'ossigeno', Ecolè Polytechnique 10-10-1992